

**EL ESTATUTO ONTOLÓGICO DE LA CONCEPCIÓN ESTRUCTURAL DEL
ENLACE QUÍMICO. APORTES A LA DIDÁCTICA DE LA QUÍMICA**

DANIEL ALEXANDER RUBIANO ARÉVALO

**Trabajo de grado para optar por el título
de Magister en Docencia de la Química**

Director:

PROFESOR PhD. Fredy R. Garay Garay

**Grupo de Investigación Filosofía, Historia y Educación en Ciencias,
FHEC. Universidad Pedagógica Nacional.**

**UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA
NACIONAL DEPARTAMENTO DE
QUÍMICA
PROGRAMA DE MAESTRÍA EN DOCENCIA DE LA QUÍMICA
Bogotá, 2017**

 UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL <i>Conocimiento. Actitudes. Valores.</i>	FORMATO	
	RESUMEN ANALÍTICO EN EDUCACIÓN - RAE	
Código:	Versión: 01	
Fecha de Aprobación:	Página 2 de 109	

1. Información General	
Tipo de documento	Tesis de Maestría en Investigación.
Acceso al documento	Universidad Pedagógica Nacional. Biblioteca Central
Título del documento	El estatuto ontológico de la concepción estructural del enlace químico. Aportes a la didáctica de la Química
Autor(es)	Rubiano Arévalo, Daniel Alexander
Director	Dr. Fredy Ramón Garay Garay
Publicación	Bogotá. Universidad Pedagógica Nacional, 2017. 106 p.
Unidad Patrocinante	Universidad Pedagógica Nacional
Palabras Claves	ENLACE QUÍMICO; ONTOLOGÍA, FORMACIÓN DE PROFESORES; QUÍMICA ESTRUCTURAL; QUÍMICA CUÁNTICA.

2. Descripción
Tesis de grado donde el aspirante a magister (autor) presenta un análisis de las concepciones que tienen los docentes en formación avanzada sobre el estatuto ontológico de la Concepción Estructural del Enlace Químico (CEEQ). Por lo que se realiza una revisión de los modelos teóricos provenientes de la química estructural y los modelos químico-cuánticos para establecer el estatuto ontológico de CEEQ, centrándose en el realismo pluralista de raíz kantiana propuesto por Lombardi y Pérez-Ransanz (2011). Por último se relacionan y se analizan los resultados obtenidos con el instrumento implementado para el establecimiento de las ontologías referidas al enlace químico y el instrumento de las concepciones de los docentes. Esto en búsqueda de relaciones entre las concepciones que hacen parte del discurso químico de los docentes y las reflexiones de tipo filosófico ontológico que se suponen necesarias en la formación de profesores de química.

3. Fuentes
Aduriz-Bravo, A., García, M., Izquierdo, M., & Quintanilla, M. (2016). Historia, Filosofía y Didáctica de las Ciencias: aportes para la formación del profesorado de ciencias. Bogotá D.C: UD Editorial.

Aponte, A. (2014). El estatuto epistemológico del concepto de enlace químico en la formación avanzada de profesores. (Tesis de Maestría). Universidad pedagógica Nacional. Bogotá D.C.

Barradas, F. (2016). Los orbitales en la educación química: un análisis mediante su representación gráfica. (Tesis Doctoral). Universidad Complutense De Madrid. Madrid.

Camarero, E. (2008). La ciencia y la enseñanza de las ciencias en España: Un ejercicio de memoria histórica. *Enseñanza De Las Ciencias*, 26(1), 125–140.

Cárdenas, Y. (2004). Espistemología, Ontología Y Complementariedad En Niels Bohr. Memoria para optar al grado de doctor. Universidad Complutense de Madrid.

Contreras, A., Otero-de-la-Roza, A., & Recio, J. (2014). El enlace químico y su supervivencia en la Química Cuántica. *An. Quím*, 110 (2), 113-120

Cordoba, M. & Martinez, J. (2014). Los orbitales cuánticos y la autonomía del mundo químico. *THEORIA* (80), 261-279.

Couper, A. (1858). On a New Chemical Theory. *Philosophical Magazine*, 16, (21), 104-116.

Crotty, M. (1998). The Foundations Of Social Research: Meaning And Perspective In The Research Process. London: Sage Publications.

Cruz, D., Chamizo, J. & Garritz, A. (1986). Estructura atómica. Un enfoque químico. México D.F: Addison Wesley Iberoamericana.

Cuello, G. (2007). "La sana crítica, sistemas de valoración de la prueba judicial" En: Colombia 2007. Bogotá: Javegraf

Del Re, G. (1998). Ontological Status of Molecular Structure. *HYLE – An International Journal for the Philosophy of Chemistry*, (4), 81-103.

Erduran, S y Mugaloglu, E (2013). Philosophy of chemistry in chemical education: recent trends and future directions. Handbook of research on history, philosophy and sociology of science springer. University of Bristol.

Erduran, S., Adúriz-Bravo, A. y Namman, R. (2007). Developing epistemologically empowered teachers: examining the role of philosophy of chemistry in teacher education. *Sci & Educ*, (16), 975-989.

Fernández, J. (2010). La enseñanza de las teorías del enlace químico como posibilitadores para el desarrollo del pensamiento crítico (Tesis Maestría). Bogotá: Universidad Pedagógica Nacional.

Garay, F. (2010). Historia de la formación de profesores en Colombia y la inclusión de la historia de las ciencias. *MaDoQuim: Memorias de la Maestría en Docencia de la Química*, 1(1), 19-24.

Gagliardi, R. y Giordan, A. (1986). La historia de las ciencias: Una herramienta para la enseñanza, *Enseñanza de las Ciencias*, 4(3), 253-258.

Gallego, A. y Gallego, R. (2007). Historia, Epistemología Y Didáctica De Las Ciencias: Unas Relaciones Necesarias. *Ciência & Educação*, 13(1), 85-98.

Gallego, R., Pérez, R. y Franco, R (2016). Lecturas en didáctica de la Química. Universidad

Pedagógica Nacional. Bogotá, Colombia.

Goddard, R & Muller, R. (2002). Valence Bond Theory. *Enciclopedia of Physical Science and Theory*, 17(3), 410-419.

Hendry, R. (1999). "Molecular models and the custion of physicalism", *HYLE. International Journal of Phylosophy of Chemistry*. (5), 143-160.

Jensen (1998). Does Chemistry Have a Logical Structure?. *Journal of Chemical Education*. 75 (6). 669-687

Kim, J. (2014). El fisicalismo no reduccionista y su problema con la causalidad mental. *Ideas y Valores*, 63(155). 235

Kossel, W. (1916). Molecule Formation as a Question of Atomic Structure. *Annalen der Physik*, (49), 229-362

Kuhn, T. (1972). La estructura de las revoluciones científicas. México: Fondo de Cultura Económica.

Langmuir, I. (1919). The structure of atoms and the octet theory of valence. *Journal of the American Chemical Society*, 7(7), 252-259.

Lewis, G.N. (1916). The Atom and the Molecule. *Journal of the American Chemical Society*, (38), 762-786

Lakatos, I. (1970). Historia De La Ciencia Y Sus Reconstrucciones Racionales, Holanda: Tecnos, S. A.

Llored, J. (2014). Whole-Parts Strategies in Quantum Chemistry: Some Philosophical and mereological lessons. *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, 20, 141-163.

Lombardi, O. y Pérez-Ranzans, A. (2011). Los Múltiples Mundos de la Ciencia. Un Realismo Pluralista y su Aplicación a la Filosofía de la Física. México: UNAM-Siglo XXI, en prensa.

Lombardi, O. & Labarca, M. (2010). Acerca del status ontológico de las entidades químicas: el caso de los orbitales atómicos. *Principia*, 14(3), 309–333.

Lombardi, O. y Labarca, M. (2006). The Ontological Autonomy of the Chemical World: A Response to Needham. *Foundations of Chemistry* 8, 81–92.

Lombardi, O. y Labarca, M. (2005). The Ontological Autonomy of the Chemical World. *Foundations of Chemistry*, (7), 125–48.

Lombardi, O. y Labarca, M. (2004). En Defensa de la Autonomía Ontológica del Mundo Químico. *Diálogos*, 84: 51–70.

Lombardi, O. & Martínez, J. (2012). Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué refiere la química cuántica? *Comscientiæ zudia, São Paulo*, v. 10(4), 649-70.

Lynn, M. (2008). The physico-chemical nature of the chemical bond: valence bonding and the path of physico-chemical emergence (Tesis Doctoral). Toronto: University of Toronto.

Matus, L. (2009). Progresiones de aprendizaje en el área del enlace químico. Análisis entre capacidades de los estudiantes y las representaciones usadas en los libros de texto (Tesis Doctoral). Mendoza: Universidad de Granada.

Pauling, L. (1931). The nature of the chemical bond application of results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules. *Journal of the American Chemical Society*, (53), 1367-1400.

Scerri, E. & McIntyre, (1997). The Case for the Philosophy of Chemistry. *Synthese*, (111) 213–232.

Scerri, E. (2000). Have Orbitals Really Been Observed?. *Journal of Chemical Education* 77, 1492–94.

Scerri, E. (2007). The Periodic Table – Its Story and Its Significance. New York: Oxford University Press.

Schummer, J. (1998). The Chemical Core of Chemistry I: A Conceptual Approach. *HYLE--International Journal for Philosophy of Chemistry*, 4(2), 129-162

Talanquer, V. (2011). Educación química: escuchando la voz de la historia y la filosofía. Universidad Pedagógica Nacional

Van Brakel, J. (1997). "Chemistry as the science of the transformation of substances". *Synthese*. (111), 1717-1728.

Van't Hoff, J. (1874). A suggestion looking to the extension into space of the structural formulas at present used in chemistry. And a note upon the relation between the optical activity and the chemical constitution of organic compounds. *Archives Neerlandaises des Sciences Exactes et Naturelles* (9), 445-454.

Vemullapalli, G. K. y Byerly, H. (1999). "Remnants of reductionism". *Foundations of Chemistry*, (12), 17-41.

Vesterinen, V. Aksela, M. y Sundberg, M (2009). Nature of Chemistry in the National Frame Curricula for Upper Secondary Education in Finland, Norway and Sweden. *Nordina*, 5(2), 200-212.

Vesterinen, V. (2012). Nature of science for chemistry education design of chemistry teacher education course. Academic dissertation to be presented, with the permission of the faculty of science of the University of Helsinki.
<https://tuhat.helsinki.fi/portal/files/24263737/natureof.pdf>.

Villaveces, J (2000). Química y epistemología, una relación esquiua. *Revista Colombiana de Filosofía dela ciencias*, (1), 9-26

Weisberg, M. (2007). Challenges to the Structural Conception of Chemical Bonding. *Philosophy of Science*, 75 (5), 932-946.

Wiser, M. (1988). The differentiation of heat and temperature: History of science and noviceexpert shift, en S. Strauss. Ed. Ontogeny, phylogeny and historical development

Zeidler, P. (2000). The epistemological status of theoretical models of molecular structure. *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, (6), 17-34.

4. Contenidos

Este trabajo de grado presenta fundamentos filosóficos del realismo pluralista de raigambre kantiana, los cuales permiten aproximarse a defender la autonomía de la química y el mundo químico de las entidades que describen los marcos teóricos propiamente químicos. Se retoma el enlace químico y su concepción estructural, que es vigente y funcional en la química, y se realiza una reconstrucción histórica de los principales modelos teóricos que refieren a este concepto, modelos tanto estructurales (Lewis, 1916; Langmuir, 1919, entre otros) como químico-cuánticos (Teoría del enlace de valencia TEV y Teoría del Orbital Molecular TOM). A partir de esto, se establecen los estatutos ontológicos de los modelos mencionados, encontrándose que los modelos estructurales admiten la CEEQ desde el realismo pluralista. Pero en los modelos químico-cuánticos, la CEEQ y sus entidades tienen un estatus ontológico híbrido, evidenciándose esto como problema central en la filosofía de la química, porque da lugar a la posibilidad del reduccionismo ontológico de la química a la física. Lo que para esta investigación puede tener impacto en las visiones de los docentes química en formación avanzada.

Se presentan estas reflexiones filosóficas dentro del realismo pluralista como necesarias en el discurso químico de los docentes, de manera que la relación entre educación química y filosofía de la química tenga un impacto positivo en las concepciones de los profesores en formación avanzada y en ejercicio.

5. Metodología

La investigación se desarrolló con docentes en formación avanzada cursantes de maestría en Ciencias Naturales de la Universidad Nacional de Colombia, la maestría en Química de la Universidad Nacional y la Maestría en Docencia de la Química de la Universidad Pedagógica Nacional. Es un grupo de 12 docentes en ejercicio de quienes se caracterizaron las ideas y concepciones sobre la CEEQ a la luz de los avistamientos filosóficos producto del establecimiento de los estatutos ontológicos de los modelos estructurales y los modelos químico-cuánticos de enlace químico. Por lo tanto la metodología de investigación es de tipo análisis diagnóstico del discurso y del contenido tanto de los docentes en formación avanzada como en los modelos teóricos sobre el enlace químico expuestos en publicaciones científicas originales.

Esta metodología se dividió en cuatro etapas. La primera etapa correspondió a la revisión de fuentes primarias sobre el enlace químico, la segunda corresponde al diseño e implementación del instrumento para el establecimiento de los estatutos ontológicos de los modelos sobre el enlace químico. La tercera etapa corresponde al diseño e implementación del instrumento encuesta para el diagnóstico de las ideas y las concepciones de los docentes frente a la CEEQ. Por último se realiza un análisis de las concepciones de los docentes en torno a la importancia de las reflexiones en el ámbito ontológico sobre el enlace químico y su concepción estructural, desde los supuestos del realismo pluralista.

6. Conclusiones

- Desde el realismo pluralista, el enlace químico y su CEEQ existe y es real. siendo innegable por la teoría cuántica. Pues en la química existen entidades que son inconmensurables y no traducibles en el lenguaje físico-cuántico. Entidades pueblan los niveles molecular y eléctrico de la química (desde Jensen, 1998).
- La tendencia de los profesores en formación avanzada es legitimar el estatus que tienen las entidades del enlace químico y su concepción estructural, así en la mayoría de los casos se conciba desde modelos híbridos y sobre todo desde una postura fisicalista y reduccionista sobre el enlace químico.
- Algunos profesores conciben los modelos químico-cuánticos y la naturaleza de las entidades cuánticas como verdades últimas, pues conciben que se aproximan a la descripción última de la realidad. Esto muestra la predominancia de un realismo mínimo y metafísico como rasgos del reduccionismo de la química a la física.
- Los modelos químico-cuánticos presentan una ontología híbrida. Como ya lo anticipaban Lombardi y Martínez (2012), TEV y TOM se valen del poder predictivo del formalismo matemático y el marco conceptual cuántico (que implica el uso de entidades cuánticas) para tratar de explicar fenómenos de la química, asumiendo matices de las entidades clásicas para poder dar respuestas.
- En el análisis filosófico-ontológico del trabajo, se rechaza la idea de hacer referencia a la CEEQ como un sistema mecánico de “bolas” y “palos” y simples uniones que tienen una forma. Sino más bien se debe entender como un sistema de eventos dado por las propiedades-entidades que poseen las entidades constituyentes del enlace químico y que se distribuyen en un espacio euclídeo.
- Los modelos de enlace estructural son representaciones simbólicas y modales, que tampoco son descripciones últimas de la realidad externa.
- Las concepciones híbridas de los docentes que están pobladas del volumen de términos y conceptos evidenciado, hacen incurrir en errores conceptuales que seguramente se ven reflejados en sus prácticas discursivas sobre la química en el aula. Creando así, un léxico químico sobre el enlace químico con matices fisicalistas y abstractos que conllevan a concepciones epistemológica y ontológicamente reducidas.
- Existe la posibilidad que la manera como deba enseñarse el concepto central *enlace químico*, esté constituida también por reflexiones filosóficas-ontológicas. Que no solo profundicen el conocimiento químico, sino que legitimen el saber químico de la didáctica de la química como saber auténtico y autónomo, no reducido ni emergente.

Elaborado por:	Daniel Alexander Rubiano Arévalo
Revisado por:	Fredy Ramón Garay Garay

Fecha de elaboración del Resumen:	19	11	2017
--	----	----	------

A mi padre Julián, mi madre Ligia y mi hermano Oscar Javier. Siempre me han acompañado en este largo proceso de formación, dando de sí lo mejor para que este objetivo de vida existiese y fuese una realidad.

La capacidad intelectual que tenemos los seres humanos nos lleva a ser ambiciosos. A tal punto que queremos comprender más allá de las limitaciones de nuestros sentidos; llevándonos a creer en la posibilidad de encontrar una verdad unificadora.

Si esto pasase, el mundo y los saberes humanos estarían en algún momento de la historia terminados.

-Daniel Rubiano-

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Fredy Ramón Garay Garay por su incondicional apoyo en la dirección de este trabajo; sus aportes fueron muy valiosos en este proceso formativo, invitando siempre a nuevas reflexiones sobre la educación en química.

Al Dr. Jaime A. Casas por sus valiosas enseñanzas en este proceso de formación. También por su amistad y sus sabios consejos en momentos de cansancio y dificultad.

A la profesora Mg. Sandra Sandoval Osorio y al profesor Mg. Gabriel Sánchez por su participación como jurados. Sus conceptos y aportes fueron valiosos en el proceso de construcción de esta investigación.

Al Dr. Manuel Soler por todas sus enseñanzas a lo largo del proceso formativo, aportes que de una u otra manera permitieron consolidar este arduo trabajo.

Al profesor Ricardo Aponte por sus interesantes puntos de vista y cuestiones que llevaron a aumentar y reafirmar el valor de este trabajo.

A mis compañeros de maestría: Xiomara, Félix, Daniel, Aldemar, Ricardo, Martha, Aura, Sonia, Asaél, y Yesid por ser parte fundamental del proceso de formación que se dio dentro de nuestra <<comunidad científica de didactas de la química>>.

A Ginna, Anggie Alexandra, Angie y Cristian por acompañar y apoyar otros aspectos importantes que son parte importante en este proceso desde el inicio de esta <<travesía>>.

Finalmente a mi familia por siempre mostrar apoyo, amor, respeto y compañía durante toda la vida y mi proceso de formación. Mi madre, Padre, hermano, Adam y Oliver. Todos ustedes son la razón de luchar y triunfar.

"Para todos los efectos, declaro que el presente trabajo es original y de mi total autoría; en aquellos casos en los cuales he requerido del trabajo de otros autores o investigadores, he dado los respectivos créditos".

Acuerdo 031 de Consejo Superior del 2007, artículo 42, parágrafo 2

TABLA DE CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	14
1. JUSTIFICACIÓN	17
2. ANTECEDENTES	19
3. MARCO TEÓRICO.....	22
3.1. FUNDAMENTOS FILOSÓFICOS.....	22
3.1.1. El realismo en química	22
3.1.2. El fisicalismo	23
3.1.3. El Realismo Pluralista	25
3.2. FUNDAMENTOS CONCEPTUALES EN QUÍMICA.....	25
3.3. La estructural lógica de la química	26
3.4. Una breve reconstrucción histórica del enlace químico.	27
4. DELIMITACIÓN DEL PROBLEMA	37
4.1. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA	38
5. OBJETIVOS.....	39
5.1. OBJETIVO GENERAL	39
5.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	39
6. METODOLOGÍA	39
6.1. PERSPECTIVA METODOLÓGICA	39
6.2. POBLACIÓN Y MUESTRA.....	40
6.3. ETAPAS DE DESARROLLO.....	40
6.4. REVISIÓN DE LOS MODELOS TEÓRICOS DE LA QUÍMICA ESTRUCTURAL Y LA QUÍMICA CUÁNTICA SOBRE CEEQ.	41
6.5. INSTRUMENTOS PARA LA RECOLECCIÓN DE DATOS.....	41
6.6. INSTRUMENTOS PARA ESTABLECER EL ESTATUTO ONTOLÓGICO DE CEEQ.	42
6.7. INSTRUMENTOS PARA ANALIZAR LAS CONCEPCIONES QUE TIENEN LOS DOCENTES EN FORMACIÓN AVANZADA RESPECTO AL ESTATUTO ONTOLÓGICO DE CEEQ.	42
7. RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	43
7.1. MODELOS CLÁSICOS DEL ENLACE QUÍMICO: GILBERT NEWTON LEWIS E IRVING LANGMUIR.	43
7.2. ENTIDADES O INDIVIDUOS CONSTITUYENTES DE LOS ENLACES QUÍMICOS, ENTIDADES-PROPIEDADES, RELACIONES Y CAUSALIDAD EN LOS MODELOS CLÁSICOS DE ENLACE QUÍMICO.	54
7.3. RESULTADOS Y ANÁLISIS DE MODELOS QUÍMICO - CUÁNTICOS TEV Y TOM.	58
7.4. EL PRINCIPIO DE LA COMPLEMENTARIEDAD Y LA FUNDAMENTACIÓN INTUITIVA TEMPORAL.....	69
7.5. LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER INDEPENDIENTE DEL TIEMPO COMO BASE MATEMÁTICA EN LOS MODELOS MECÁNICO CUÁNTICOS TEV Y TOM..	71
7.6. ANÁLISIS DE LAS ONTOLOGÍAS REFERENTES AL ENLACE QUÍMICO DESDE LOS PRESUPUESTOS TEÓRICOS DEL REALISMO PLURALISTA.	77

7.6.4.	Primera condición: Raíces kantinas	78
7.6.5.	Segunda condición: Relatividad conceptual	78
7.6.6.	Tercera condición: Pluralismo ontológico	79
7.6.7.	Cuarta condición: Democracia teórico observacional. Intraontológica e interontológica.....	79
7.6.8.	Quinta condición: La inconmensurabilidad.	80
8.	CONCLUSIONES SOBRE EL ESTABLECIMIENTO DE ONTOLOGÍAS DE LOS MODELOS ESTRUCTURALES Y QUÍMICO-CUÁNTICOS RESPECTO A LA CEEQ..	81
9.	RESULTADOS Y ANÁLISIS RESULTADOS DE INSTRUMENTOS PARA RECOLECCIÓN DE INFORMACIÓN SOBRE LAS CONCEPCIONES QUE TIENEN LOS DOCENTES EN FORMACIÓN AVANZADA ACERCA DE CEEQ.	83
10.	CONCLUSIONES ACERCA DE LAS CONCEPCIONES DE LOS PROFESORES PARTICIPANTES EN FORMACIÓN AVANZADA	85
11.	RECOMENDACIONES.....	87
12.	BIBLIOGRAFÍA.....	88

INTRODUCCIÓN

En la química, el enlace químico se considera un concepto central, pues posibilita la comprensión del conocimiento químico (Lombardi & Labarca, 2011) acerca de la composición química, las propiedades químicas de la materia, la combinación química, el cambio químico y las propiedades químicas, conduciendo no solo a la concepción de la estructura molecular y la existencia de entidades químicas sino también la comprensión de las reacciones químicas (Contreras-García, Otero-de-la-Roza & Recio, 2014). Sin embargo, a inicios del siglo XX, el surgimiento de la teoría cuántica como un nuevo campo conceptual que aporta respuestas a interrogantes sobre fenómenos de la materia y la radiación, permite suponer que la descripción de la naturaleza de las entidades que pueblan el nivel microscópico es diferente a las descripciones que se hacen de estas entidades en la física clásica. De paso, llevando a cuestionar el estatus ontológico de las entidades que pueblan el mundo de la química y en particular la concepción estructural del enlace químico.

Al considerar algunos de los supuestos de la mecánica cuántica, (por ejemplo, el supuesto de que los electrones no están localizados alrededor del núcleo, que hay múltiples interacciones electrónicas en las entidades moleculares, que el núcleo del átomo es estático y el principio de incertidumbre de Heisenberg), no es posible afirmar que los enlaces químicos están localizados, ni que están dispuestos en el espacio con cierta dirección uniendo entidades elementales, cuyas “rupturas” y nuevas conformaciones corresponden al cambio químico como se asume en los modelos clásicos estructurales de la química (Llored, 2014; Del Re, 1998; Weisberg, 2007; Scerri, 2007; Zeidler, 2000), modelos tales como el modelo de Lewis (1916) y el modelo de Langmuir (1919).

En los últimos años, este problema ha adquirido gran relevancia en la filosofía de la ciencia, y en específico desde la filosofía de la química, pues la concepción estructural del enlace químico constituye un caso de reduccionismo epistemológico y reduccionismo ontológico de la química a la física. Para este caso, se considera que la raíz de la problemática que se genera con este supuesto reduccionista, está asociada a la relación interteórica que aparece con el surgimiento de la química cuántica, campo de conocimiento que está apoyada en supuestos teóricos provenientes de la mecánica cuántica y la química estructural clásica. En otras palabras, en la química cuántica se asume el formalismo matemático de la función de onda, que define un conjunto de probables estados energéticos de electrones de un sistema multielectrónico, el parámetro de *amplitud de probabilidad* de Born, y supuestos clásicos de localización y geometrización de las entidades moleculares. Lo que hace que en la química cuántica el referente objetivo de esta concepción aún se mantenga, pero de una manera híbrida en la que la naturaleza de las entidades es predominantemente

cuántica, de acuerdo con el trabajo de Max Born (1927) y Linus Pauling (1931).

No obstante, es sabido que los intentos de reduccionismo epistemológico de la química a la física han fracasado; pero han trascendido del ámbito epistemológico hacia el ámbito de lo ontológico. Pues se ha considerado que, debido a que los modelos teóricos de la física no dan cuenta del comportamiento químico de la materia, no existe la posibilidad de reducir epistemológicamente la totalidad de las teorías de la química, las leyes químicas, las formas de proceder científico de la química. (Hendry, 1999; Van Brakel, 1999, Vemulapalli y Byerly, 1999; Scerri, 2007, Lombardi y Pérez-Ranzans, 2011). Ante esto, surgen preguntas alrededor de las discrepancias que existen en cuanto a la descripción de las entidades que aportan tanto la física cuántica como la química estructural. Interrogantes que llevan a cuestionar el estatus ontológico de las entidades clásicas y las entidades cuánticas.

De acuerdo con lo anterior, en este trabajo de investigación se realiza un análisis sobre el estatuto ontológico de la concepción estructural del enlace químico como aporte a la legitimación del mundo de la química y su aparato conceptual, a partir del análisis de los supuestos de modelos teóricos de la química estructural y los supuestos subyacentes de las nuevas estructuras conceptuales provenientes de la química teórica. Para esto, se emplea una versión de realismo, un realismo inclusivo o <<democrático>> que admite ontologías inconmensurables entre sí: el realismo pluralista (propuesta de Lombardi y Pérez, 2011). Dando así la posibilidad de sostener la idea que la ontología de la concepción estructural del enlace químico es legítima e irreducible a la teoría cuántica, presunción que podría no solo tener un gran impacto en la filosofía de la química como campo emergente del conocimiento de las ciencias, sino que puede tener implicaciones en la formación del profesorado de química frente a este concepto central, mostrando la necesidad de que en los programas de formación docente se resalte también la dimensión ontológica. Evitando concepciones reducidas de la química como una ciencia históricamente importante y representativa en la humanidad, rescatando ese valor científico autónomo y diferenciado de otras ciencias naturales. (Erduran y Mugaloglu, 2015, Talanquer, 2011, Erduran, Adúriz-Bravo, Namman, 2007).

En este sentido, se han seleccionado antecedentes de investigación que fueron llevados a cabo con una metodología de corte cualitativo, y de investigación-acción y análisis del discurso químico en libros de texto y otras fuentes de información empleadas en diferentes niveles académicos de formación en química. En otros seleccionados, no se llevan a cabo intervenciones en el aula, pero su importancia reside en las bases teóricas como lo son la importancia del estatuto ontológico de la concepción estructural del enlace químico. De esta manera, los presupuestos teóricos que sustentan esta propuesta están relacionados con fundamentos filosóficos que permiten aproximarse a un análisis epistemológico y ontológico de la concepción estructural del enlace químico, fundamentos que permiten acceder al análisis ontológico de los supuestos sobre

el enlace químico provenientes de la química estructural y los supuestos provenientes de la mecánica cuántica. Por lo tanto, se hace una breve reconstrucción histórica de los modelos clásicos de enlace químico que son propios de la química, y de los modelos químico-cuánticos de enlace. Reconstrucción que permite evidenciar las entidades a las que refiere cada uno de estos marcos conceptuales.

La metodología de esta investigación se enmarca dentro del paradigma epistemológico del constructivismo, centrado en una perspectiva teórica de la hermenéutica. Dentro de los supuestos del constructivismo se admite que el conocimiento y el mundo es el resultado de la construcción y la reconstrucción de una realidad, que tiene su origen en la interacción del sujeto cognoscente y la realidad independiente o externa del sujeto. Lo cual admite el realismo pluralista que es “columna vertebral” de este trabajo. Para esto se realiza el análisis diagnóstico de los modelos de enlace químico y de las concepciones que tienen los docentes, con la intención de comparar el estatuto ontológico de la concepción estructural del enlace químico. Para ello, se diseñaron y emplearon instrumentos que permitieron la recolección de información de interés y dieron lugar a dos momentos centrales de este trabajo: 1) Análisis del contenido de los modelos teóricos que explican el enlace químico y la concepción estructural del enlace químico (CEEQ), y 2) Análisis de las concepciones de los profesores en formación avanzada sobre CEEQ. Por último se concluyó en cada una de las secciones, siendo el momento 1 fundamental para proyectar las consideraciones del momento 2, lo que permite tomar ciertas consideraciones frente a la importancia de la fundamentación filosófica en la formación de profesores de química. Y en específico, la importancia de retomar el debate ontológico sobre las entidades del mundo de la química ante la problemática del reduccionismo.

1. JUSTIFICACIÓN

La filosofía de la química es un campo de conocimiento desde el que se consideran reflexiones acerca de la autonomía de la química, reflexiones sobre la metafísica de las entidades objeto de estudio de la química, el realismo, los modelos y explicaciones teóricas en química, la ética del proceder científico químico en la sociedad (Labarca, 2005, Garay, 2012). Actualmente existe una importante relación entre estas reflexiones y la educación en química (Vesterinen, Aksela y Sundberg, 2009), que lleva a suponer que la formación en química debe estar cimentada en espacios académicos en los que se incluyan reflexiones históricas, éticas, epistemológicas y ontológicas acerca de la química; relación que tiene como objetivo alcanzar un mejor entendimiento de esta ciencia como disciplina autónoma (Vesterinen, 2012).

Esto lleva pensar en la generación de espacios de formación de profesores que promuevan en nuestro contexto educativo colombiano, la construcción de un discurso químico autónomo y coherente sobre la naturaleza del conocimiento químico y sus cambios a lo largo de la historia. Pero para llegar a ello, es imperante generar etapas iniciales de diagnóstico y reflexión sobre las diferentes concepciones de los docentes, apoyándose en los fundamentos filosóficos de la química, para así trazar el camino que lleve a la formulación de dichos espacios de formación docente. Esta iniciativa es el aspecto central en esta investigación, por lo que se aborda la problemática del reduccionismo ontológico de la química a la física, siendo este uno de los principales tópicos de esta rama de la filosofía de la ciencia. Para ello se retoma el caso del estatuto ontológico de la concepción estructural del enlace químico CEEQ y la manera como a este se refieren los docentes en formación avanzada.

El reduccionismo epistemológico de la química a la física, gira alrededor del hecho de que de los supuestos mecánico-cuánticos se pueden derivar descripciones “más verdaderas y precisas” del concepto del enlace químico, lo que implica que al aceptarse los supuestos sobre la naturaleza de las entidades cuánticas, se aceptaría la posibilidad de que exista una realidad última de naturaleza cuántica. Esto pondría en tela de juicio la existencia de entidades químicas y se “desdibuja” la CEEQ (Villaveces, 2000). En otras palabras, los tratamientos matemáticos químico-cuánticos que describen el estado energético de un sistema molecular, hacen que el mundo químico de *la estructura de los enlaces y las formas estructurales de las moléculas*, junto con sus propiedades, se reduzca al poder probabilístico de predicción de la teoría mecánico-cuántica. Lo que lleva a suponer que la química sea únicamente fenomenológica o emergente de las leyes, las entidades, las entidades-propiedades y la causalidad de la física, o reducida a la física no solo epistemológicamente, sino también ontológicamente.

No obstante, la mecánica cuántica de la física y la mecánica cuántica empleada en la química teórica, no dan cuenta del comportamiento de las entidades moleculares poliatómicas y polielectrónicas. Pues las ecuaciones función de onda de estas resultan tan complejas que no tienen solución matemática (Lombardi &

Martínez, 2012). Sin embargo, son muy funcionales en la descripción de moléculas de baja masa molecular, resultando incluso más funcionales y cercanas a lo experimental que las predicciones hechas a partir de los métodos estructurales (Weisberg, 2008). Entonces, el debate pasa de lo epistemológico al ámbito de lo ontológico, dando lugar a preguntas alrededor de la existencia de las entidades a las que la química estructural refiere; cuestionando de paso, la idea de una realidad última y verdades absolutas sobre objetos autoidentificantes y autosubsistentes que sean los “responsables” del comportamiento químico de la materia.

En defensa del mundo de la química y por ende del discurso químico, surgen las siguientes preguntas; al admitirse la posibilidad de existencia de las entidades constituyentes de la concepción estructural del enlace químico, concepción que hoy en día es vigente debido a aspectos como el amplio marco conceptual de la química que se ha desarrollado a partir de esta concepción y su carácter predictivo y organizativo: ¿Existen estas entidades?, y si existen ¿Cómo son estas entidades?, ¿por qué para la física no existen estas entidades pero para la química sí?

Puede ser que el camino para dar respuestas a estas preguntas en favor de la autonomía de la química, tenga una profunda implicación teórica y filosófica. Por lo que en este trabajo se propone retomar la propuesta de Lombardi & Labarca (2004, 2005, 2006 & 2010); Lombardi y Pérez (2011), propuesta en la que se plantea la posibilidad de concebir ontologías múltiples sobre el enlace químico desde una postura Kantiana del pluralismo ontológico y el realismo pluralista. En donde se podría suponer que todo lo que implica hablar de la CEEQ lleva consigo un estatus ontológico igualmente legítimo que el de las entidades cuánticas a las que se refieren la teoría cuántica y los modelos químico-cuánticos.

De esta forma, se pretende legitimar la ontología a la que refiere el discurso químico de los modelos estructurales de la química, como respuesta a los supuestos reduccionistas epistemológicos y ontológicos. Defensa que de alguna manera ayude a legitimar y fundamentar el saber fundamente de la didáctica de la química. Por lo tanto resulta de interés proporcionar a la comunidad investigativa en didáctica, fundamentos e insumos teóricos que servirán como soporte en el planteamiento de espacios académicos para la formación de profesores de química, aportando al desarrollo y apropiación de lo que Schummer (1998) menciona como “la arquitectura conceptual” de la química como ciencia autónoma. Todo ello en miras de la apropiación de un discurso referente al marco conceptual propio, que le brinde al profesor las herramientas conceptuales para enfrentarse a las demandas del ejercicio docente en ciencias naturales y química particularmente. (Aduriz-Bravo, García, Izquierdo & Quintanilla, 2016; Garay, 2010; Camarrero, 2008; Gallego, Gallego y Pérez, 2007; Gagliardi y Giordan, 1988; Wiser, 1986)

2. ANTECEDENTES

En este trabajo de investigación se han recolectado antecedentes de investigación correspondientes a tesis de pregrado y posgrado a nivel local (Universidad Pedagógica Nacional) y nivel internacional. En primer lugar se retoma el trabajo de Barradas-Solas (2016), tesis doctoral, en donde el objetivo central es establecer el papel de la concepción de los orbitales en la educación química, analizando casos de uso de sus representaciones gráficas. El autor concluye que el enlace químico no posee un referente ontológico, no obstante, las representaciones fundadas en modelos semi-cuánticos facilitan la enseñanza de este concepto. El principal aporte de este trabajo es el análisis sobre la utilidad de la “realidad” de las representaciones que hay en diferentes fuentes de consulta especializadas de química, pues son explicativas en la enseñanza. Sin embargo, el autor resalta la importancia de entender los orbitales moleculares desde las perspectivas de las estructuras conceptuales de la química teórica legitimando su importancia en la química y no entenderlos desde la mecánica cuántica, puesto que esta tiende a deslegitimar el poder explicativo de la química.

Este trabajo tiene suma importancia en la actual investigación, cuando el autor afirma que la química cuántica es compleja en su entendimiento y presenta problemas en la enseñanza. Pues afirma que los modelos químico cuánticos son <<híbridos>> y son usados de una manera intuitiva y predictiva. Pero se carece de claridad entre el uso de los modelos clásicos estructurales y los modelos químico-cuánticos. Esto permite suponer que la relación interteórica que evocan estos modelos químico cuánticos genera dificultades referentes a lo epistemológico y lo ontológico, afectando por ende el discurso químico que se maneja en el aula por la posibilidad de que aparezcan concepciones deformadas y reducidas del enlace químico.

En segundo lugar, a nivel local se tiene como antecedente el trabajo de Aponte (2014), “El estatuto epistemológico del concepto de enlace químico en la formación avanzada de profesores”. En esta tesis de maestría se establece el estatuto epistemológico del enlace químico, desde el marco de la filosofía de la química, alcanzando cambios significativos en la versión del estatuto epistemológico que los docentes en formación avanzada tenían. El autor afirma que es oportuno analizar la importancia de la concepción estructural del enlace químico en sólidos cristalinos que depende de la capacidad relacional de los elementos dentro de entidades compuestas, pero se afirma que el enlace químico no existe y tampoco es real. Sin embargo, si existen modelos explicativos en los cuales se evidencia un referente ontológico.

Esta tesis es importante para la investigación actual en el punto que desde las concepciones de los profesores se cuestiona el estatus ontológico del enlace químico, pues se afirma que no existe y no tiene referente ontológico. Se observa que se deslegitima el estatus ontológico de esta entidad a nivel submicroscópico, sin embargo lo que sí existe y es real son las evidencias del comportamiento a un nivel macro y desde un punto de vista químico-cuántico, las evidencias de los

orbitales moleculares en la química molecular. El autor, se basa en los supuestos del instrumentalismo de Hacking, que llevan a pensar en que el enlace químico es una entidad funcional teórica. Esto puede significar que los docentes si bien emplearon conceptos propios de la química en explicaciones sobre el enlace químico, hay una alta tendencia a legitimar entidades provenientes de la química teórica, entidades que son de naturaleza cuántica. Esto evoca la problemática de la búsqueda de una ontología última y terminada, que tiene acceso epistémico desde un marco conceptual privilegiado, como lo es la mecánica cuántica por su funcionalidad.

En 2012, Lombardi y Martínez publican un artículo de investigación sobre reflexiones acerca de la ontología de la química cuántica. Para ello abordan el concepto de enlace químico desde la perspectiva de los dos enfoques a través de los cuales la ecuación de Schrödinger se aplica a los sistemas químicos moleculares: la teoría del enlace de valencia (EV) y la teoría del orbital molecular (OM). Afirman que estas teorías son modelos que incorporan conceptos y leyes tanto del ámbito de la mecánica cuántica como de la química estructural. Estas consideraciones les permitirán argumentar que la química cuántica no posee un referente ontológico autónomo, sino que se trata de un ámbito científico cuya vigencia descansa sobre su éxito práctico en el cálculo y la predicción.

Este trabajo permite retomar la noción que se manejará en este trabajo sobre el límite interteórico de la mecánica cuántica y la química estructural. Esto tiene un amplio espectro investigativo sobre reflexiones filosóficas en química acerca de la autonomía de esta ciencia, y sobre todo reflexiones que incitan a volcar especial atención en el ámbito ontológico en la educación química en general y la formación del profesorado de química.

En tercer lugar se tiene el trabajo de Weisberg (2007), en donde evalúa la concepción estructural del enlace químico desde la teoría del enlace de valencia (TEV) y la teoría del orbital molecular (TOM), concluyendo que la concepción estructural del enlace químico es insostenible a medida que se consideran mayores efectos y condiciones de deslocalización que mejoran las ecuaciones mecánico-cuánticas. El aporte de este trabajo a la actual investigación está relacionado con el hecho de que la ontología de la concepción estructural puede sobrevivir a los modelos modernos del enlace químico pues las aproximaciones mostradas por el autor describen las características electrónicas de las moléculas en términos estructurales.

En las conclusiones, Weisberg afirma que implica un gran reto sostener la ontología de la CEEQ frente al “poder” explicativo y predictivo de la mecánica cuántica, y resulta un punto de partida para este trabajo porque que permite reflexionar sobre el tipo de realismo sobre el cuál se legitiman las ontologías referidas al enlace químico. Pues la química estructural aún es vigente y tiene un amplio poder explicativo sobre sistemas complejos de moléculas, de los cuales se emplea la CEEQ en las predicciones frente a la naturaleza de los enlaces y

por ende a la naturaleza de las interacciones.

En cuarto lugar, se tuvo en cuenta el trabajo de Matus (2009), titulado “Progresiones de aprendizaje en el área del enlace químico. Análisis de coherencia entre capacidades de los estudiantes y las representaciones usadas en los libros de texto”. En su tesis de doctorado, Matus Leites lleva a cabo un estudio exhaustivo del impacto de las representaciones del enlace químico incluidas en los libros de texto utilizados al comienzo y al final de la educación secundaria obligatoria, así como de los textos universitarios. Determinando los niveles explicativos y sus características alcanzado a través del uso de las representaciones de los modelos del enlace químico y su relación con la estructura molecular.

Por último, se retomó como antecedente el trabajo de Lynn-Harris (2008). Si bien esta tesis no es llevada a cabo como una investigación basada en intervención didáctica, aporta bases conceptuales y metodológicas que permiten analizar el punto de vista del reduccionismo epistemológico y ontológico de la química, y en específico el caso de la concepción estructural del enlace químico. Cabe resaltar que esta tesis sostiene argumentos que en este presente trabajo de maestría se cuestionarán, como la fisicalización o reduccionismo del enlace químico, siendo tema central de trabajo que se está adelantando.

3. MARCO TEÓRICO

3.1. FUNDAMENTOS FILOSÓFICOS

La filosofía de la química es un campo de conocimiento dedicado al análisis de problemas filosóficos gestados en el seno de la dinámica científica de la química como ciencia autónoma, teniendo así un ámbito legítimo de reflexión filosófica estableciéndose como una herramienta de análisis útil tanto a los químicos como a los educadores en química (Labarca & Lombardi, 2005). Estos problemas, en los que se centra la reflexión filosófica, abarcan tópicos como la metafísica de las entidades químicas, el problema del realismo, la autonomía de la química, modelos y explicaciones en química, leyes y teorías químicas, problemas que están íntimamente relacionados con el objeto de investigación de este trabajo: el estatuto ontológico de la concepción estructural del enlace químico. A continuación se presentan referentes filosóficos centrales que para esta propuesta de investigación.

3.1.1. El realismo en química

En libros de texto y demás publicaciones de tipo científico, es común encontrar que las entidades pertenecientes a la concepción estructural del enlace químico, tienen referentes ontológicos en la física, permitiendo suponer que las interacciones a nivel molecular tienen correlación directa con lo que se percibe a nivel macroscópico. Esto ha permitido suponer en contextos científicos y educativos de la química, que la funcionalidad que tienen estos “engranajes teóricos” en la actividad científica (las entidades) son evidencia de su existencia, dotándolas de un referente ontológico propio del mundo de la física; caso tal, como comúnmente es conocido en el enlace químico como “balls and sticks”.

Del Re (1998), propone algunas nociones básicas de juicios de existencia para juzgar la realidad de las entidades relacionales del nivel molecular basándose en argumentos de J. Schummer, estableciendo que las entidades se pueden clasificar como entidades R1, que son entidades que pueden ser percibidas con los sentidos, R2 para entidades que se cree que existen debido a que hay una evidencia analógica y lógica. Respecto a esto, los químicos y los educadores en química establecen que las entidades del enlace químico, como bolas y palos y su direccionamiento espacial formando estructuras, pueden existir o son “reales” debido a que hay evidencias experimentales y permiten hacer cálculos y predicciones con cierta cantidad de precisión.

Dentro del realismo se conciben tres tendencias para considerar que “hay cosas

reales”: realismo ingenuo, realismo natural y realismo crítico. (Cuello-Iriarte, 2007).

El realismo ingenuo no está ligado a ninguna reflexión sobre el conocimiento relacionado con los objetos, por lo que desde este se puede afirmar que un objeto es real tal como se percibe. El realismo natural incluye las “ambigüedades” que puede tener la percepción. Hasta este punto, dentro de la actividad científica de la química y en la enseñanza se atribuye “realidad” a las entidades del enlace químico desde un proceso denominado *realismo ingenuo progresivo*, como si el trabajo científico de la química basado en su maquinaria conceptual fuese en una búsqueda implacable de la verdad (Aponte, 2014).

Desde el realismo crítico, también puede ser realizado un juicio de existencia de las entidades que en este trabajo se denominarán de ahora en adelante *entidades teóricas*, pues este realismo propone que la percepción es subjetiva y más en relación con un conocimiento específico. Cuello Iriarte (2007) presenta que en el realismo crítico hay tres argumentos fundamentales:

- a) La *diferencia entre percepción y representación* que consiste en que la percepción puede ser realizada por varios sujetos, mientras que las representaciones son perceptibles e inequívocas solo para el sujeto que las posee.
- b) La *dependencia de las representaciones frente a la voluntad*, consiste en que las representaciones pueden ser evocadas y modificadas a voluntad, pero las percepciones sobre un objeto que es real no pueden ser modificadas a voluntad.
- c) La *independencias de los objetos materiales de la percepción respecto de la percepción misma* consiste en que los objetos reales continúan existiendo así no se tenga percepción de ellos.

3.1.2. El fisicalismo

El fisicalismo se define como una doctrina filosófica que caracteriza la naturaleza de lo real, afirmando que todo aquello que existe o interactúa es exclusivamente físico. El fisicalismo puede ser caracterizado como fisicalismo reduccionista y fisicalismo no reduccionista. El *fisicalismo reduccionista* está relacionado con la reducción epistemológica y ontológica de otras ciencias, atribuyendo los fenómenos objeto de estudio a interacciones entre entidades teóricas y materiales propias de la física, estableciendo un supuesto de dependencia de los paradigmas físicos.

Por ejemplo, existe una reducción epistemológica y ontológica de la concepción estructural del enlace químico, pues se asume que esta tiene un carácter

metafórico debido a la fuerte postura que se toma de la mecánica cuántica al rechazar el carácter material de las entidades del enlace químico y al atribuir que el enlace químico se da a partir de condiciones específicas de energía potencial y energía cinética a nivel submolecular. Es decir, que partir de la interpretación de la solución de la ecuación de función de onda, en la que se consideran los efectos de las múltiples interacciones electrónicas, y el movimiento del núcleo de los átomos, el enlace químico es simplemente un fenómeno eléctrico y energético en el cual ocurre la estabilización de las moléculas, alcanzándose mayor precisión en el cálculo de energías de enlace y distancia de enlace (Weisberg, 2007).

Kim (2014) argumenta que “la tesis ontológica básica del *fisicalismo no reduccionista* confiere cierto tipo de supremacía a lo físico: toda existencia concreta es física –no existen particulares que no sean físicas [...]”. Respecto de las propiedades, fenómenos o interacciones, hay una primacía física en donde los fenómenos y “eventos” tienen que ser sí y solo sí respondientes a las leyes y explicaciones físicas. En otras palabras, “todo se debe a una ley física” pero no se objeta la autonomía epistemológica de las otras ciencias; es decir que cada ciencia interpreta y configura fenómenos e interacciones bajo sus propios preceptos de actuación y dinámica científica, pero que también pueden ser más legítimamente explicados en el campo de la física.

Lombardi y Labarca (2011), argumentan que hay un tipo de *monismo*¹ no reduccionista conocido como *emergentismo*, como postura filosófica de muchos filósofos de la química, en la que se argumenta que si bien no hay un reduccionismo epistemológico hay un *surgimiento o emergencia* de fenómenos químicos subyacentes de fenómenos físicos o interacciones entre entidades teóricas y/o materiales, lo que sugiere que hay una “supremacía epistemológica” de la física frente a la química, argumentan los autores. Es decir que, para este caso, la concepción estructural del enlace químico está supeditada a fenómenos “primigenios” de la ontología física, de los cuales puede surgir un acomodamiento de entidades y sus interrelaciones tales como las estudia la química. Podría decirse en palabras de Eric Scerri (1997), desde el punto de vista del emergentismo, que “parecería que la dependencia ontológica de la química respecto de la física puede ser un resultado casi inevitable”.

Las reflexiones sobre el fisicalismo, son de suma importancia en este trabajo, pues acá se evoca una discusión que pretende reclamar gran parte de la autonomía de la química, en este caso, lo que refiere al enlace químico y la estructura molecular; autonomía que “se diluye” entre los límites interteóricos que hay con la “poderosa” mecánica cuántica de la física. Pues una manera de abordar esta problemática es evaluar la concepción estructural del enlace químico a lo largo de los modelos teóricos desde una perspectiva de ontologías múltiples,

¹ El monismo fisicalista o reduccionista es el primer tipo de monismo y consiste en reducir todos los niveles de la realidad al nivel físico. Toda la realidad, incluido el ser humano, sería explicable en términos de propiedades y entidades físicas bajo las leyes físicas que gobiernan el mundo perceptible.

propuesta de varios de los trabajos de Labarca y Lombardi (2004, 2005, 2006 & 2010).

3.1.3. El Realismo Pluralista

Lombardi y Pérez (2011) proponen que para abordar este problema, y por ende legitimar ontológicamente la concepción estructural del enlace químico de los modelos teóricos de la química, la concepción de ontologías múltiples es una buena alternativa, pues está basada en el pluralismo ontológico que no niega la coexistencia de diversos puntos de vista. Este realismo tiene sustento teórico en las concepciones kantianas del realismo pluralístico (Lombardi & Pérez, 2011; Lombardi, 2012) en donde el termino pluralismo aplicado a la realidad sugiere el abandono de una presunción de la concepción general y unilateral de la realidad que sustenta que “todo lo que se observa es verdadero”. Es decir, que lo que se piensa que es “real” es sólo lo que es perceptible por los sentidos. Sin embargo, si se evalúa la validez de los argumentos que permiten hacer juicios de existencia, se puede afirmar, desde Kant, que la “realidad” tal y como se concibe es producto de la percepción del individuo y un contexto cognitivo. Esto remite a pensar que las concepciones de la química legítimas y diferenciadas, por la interacción del investigador y el marco conceptual establecido legitimando así la “realidad del mundo químico”.

Este enfoque de ontología propia y plural de la química, no niega la existencia de la ontología de otras ciencias, es decir, puede coexistir con la ontología de la física y el respectivo estatuto ontológico que pueda darle a la estructura molecular y al enlace químico, afirman Lombardi y Pérez-Ransanz (2011). Este enfoque es objeto de estudio de este trabajo, puesto que al realizar un análisis del estatuto ontológico de la concepción estructural del enlace químico se podrá poner a prueba la hipótesis de las ontologías múltiples desde un punto de vista estructural de la química en el nivel eléctrico y su correspondencia con el nivel molecular.

3.2. FUNDAMENTOS CONCEPTUALES EN QUÍMICA

En este apartado se realizará una breve presentación de aspectos conceptuales de la química, que son fundamentales para el análisis de los modelos teóricos del enlace químico. Estos son: estructura lógica de la química (Jensen, 1998) y una breve reconstrucción histórica de la concepción estructural del enlace químico que permita evidenciar aspectos ontológicos a los que refieren los modelos teóricos químicos, tanto clásicos como mecánico-cuánticos.

El enlace químico es un concepto central en la química, y es una concepción de la que los científicos han desarrollado marcos conceptuales que permiten explicar

(hasta ciertos límites conocidos, cada modelo teórico) el fenómeno de la combinación, el cambio químico y las propiedades químicas; describiendo así entidades que pueblan el mundo submicroscópico de la química, llevando a hacer representaciones simbólicas de la estructura molecular, los enlaces químicos, y las entidades atómicas. Estas representaciones, dadas como figuras geométricas y proyecciones espaciales en un espacio euclidiano, tienen un carácter predictivo y deductivo en el estudio del comportamiento químico de las sustancias que hoy en día son funcionales para la praxis química (Schummer, 1998; Zeidler, 2000).

En el caso de la teoría cuántica y los modelos de enlace químico químico-cuánticos, las entidades a las que cada uno de estos marcos teóricos refiere, son significativamente diferentes respecto a las entidades de la concepción estructural del enlace químico. Cuya posibilidad de existencia puede ser contemplada desde una fundamentación intuitiva temporal, diferente a la fundamentación espacio-temporal clásica que se emplea en la física clásica. (Cárdenas, 2004). Dentro de esta característica de la posibilidad de existencia de objetos cuánticos, aparecen todos aquellos supuestos que son inconmensurables en el mundo clásico de fundamentación espacio-temporal, como lo son la dualidad onda-partícula, cuantización de la energía y la materia, el principio de complementariedad, el principio de incertidumbre, entre otros.

3.3. La estructural lógica de la química

La enseñanza de la química podría estar guiada a partir de la estructura lógica de la química, es decir las leyes y los principios que rigen el mundo macroscópico y submicroscópico (Johnstone, 1983). Sin embargo, diferentes factores como un inadecuado uso del lenguaje de la química e imprecisiones conceptuales, pueden hacer incurrir en el tránsito indiscriminado por estos niveles estructurales, atribuyendo “responsabilidad” y referentes ontológicos a distintas entidades de los fenómenos observables a nivel macroscópico. En otras palabras, empujando la ontología del mundo macroscópico (mecánica newtoniana, el uso de analogías y representaciones con esquemas y modelos).

La situación anterior puede provocar que los estudiantes tengan ideas no adecuadas sobre la concepción estructural del enlace químico asociada a las propiedades de grupos de entidades químicas. Como alternativa a este problema, se retoma el modelo de Jensen (1998), en el cual plantea que la conceptualización química está conformada por una estructura lógica dividida en tres niveles: molar, molecular y eléctrico, que también presenta tres dimensiones en las que ocurren los fenómenos químicos: composición y estructura, energía y tiempo.

Tabla 1. Niveles estructurales de la química, tomado y adaptado de Jensen (1998).

Nivel estructural	Dimensión de composición y estructura	Dimensión energética	Dimensión temporal
Nivel molar	Composición relativa de sustancias simples y compuestas, soluciones y mezclas. Designación empírica de alomorfos (estado, color, forma cristalina, alfa, beta, etc.)	Entropías calorimétricas y calor. Energías libres y equilibrios constantes.	Leyes de tasa experimental. Parámetros experimentales de Arrhenius y/o entropías y calores de activación.
Nivel molecular	Fórmulas estructurales y absolutas. Racionalización de alomorfos como variaciones ya sea en la composición absoluta	Interpretación molecular de la entropía. Interpretación de calores de formación en términos de calores de atomización, energías de enlace, mecánica molecular.	Mecanismo de reacción. Interpretación molecular de activación de entropías y complejos activados.
Nivel eléctrico	Fórmulas electrónicas (estructura de Lewis y configuración electrónica) Variaciones en las composiciones electrónicas o nucleares (iones e isótopos).	Mecanismos de reacción iónica y fotoquímica. Efecto isotópico. Calculo de energías de activación. Índices de reactividad electrónica.	Mecanismos de reacción iónica y fotoquímica. Efecto isotópico. Calculo de energías de activación. Índices de reactividad electrónica.

De este modo, es posible caracterizar la naturaleza de la estructura molecular asociada al enlace químico y evaluar la posibilidad de atribuir o no un referente ontológico a las entidades que están asociadas en cada uno de los modelos teóricos teniendo en cuenta la importancia del nivel eléctrico de la química.

3.4. Una breve reconstrucción histórica del enlace químico.

Hacia 1850, Charles Gerhardt formularía la teoría de los tipos, teoría con la que se pretendía agrupar las sustancias químicas con características similares de acuerdo con sus reacciones características. Por ejemplo, del “tipo metano” (Kekulé, 1858), en el que se puede observar el carbono tetravalente (figura 1), que al reaccionar con cuatro radicales cloro y oxígeno produce dióxido de carbono y tetracloruro de carbono.

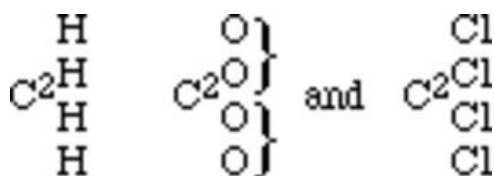


Figura 1. Tetravalencia del carbono y algunos equivalentes. Tomado de: Philosophical Magazine16, 104-116 (1858). as excerpted in Alembic Club Reprint #21, On a New Chemical Theory and Researches on Salicylic Acid. Pág. 111.

Con estas presunciones, aparece la idea de lo que se denominaría formulas estructurales, que permitían realizar predicciones en tipos de reacciones químicas y a la vez pudiéndose agruparles según el tipo al que corresponden. Esta teoría fue ciertamente explicativa, más allá de las dificultades que presentaba como por ejemplo en la aparición de isómeros, fenómeno tal al que se referían Justus Von Liebig (1803-1873), Friedrich Whöler (1800-1882) y Jöns Jacob Berzelius (1779-1848) como la existencia de dos o más moléculas que tienen el mismo porcentaje en peso de sus átomos constituyentes, como lo es el caso de los ácidos tartárico y racémico. (Garritz, Chamizo y Cruz-Garritz, 1991).

El alemán Wilhelm Hermman Kolbe (1818-1884) fue quién se aproximó mayormente a la representación de fórmulas estructurales aceptadas hoy en día, prediciendo la síntesis y algunas propiedades de alcoholes. A este punto se empieza a notar la importancia de la ubicación o la disposición de los átomos en un espacio geometrizado. Aspecto que lleva consigo los inicios de la concepción estructural molecular y la estructura de los enlaces químicos.

Basándose en las evidencias de las proporciones en las que se combinaban algunos compuestos organometálicos, el padre de la química organometálica Edward Frankland (1825-1899) estableció que algunos metales como el arsénico y el zinc se combinaban con radicales orgánicos en proporciones de 1:3 y 1:5 (Garritz, *et al.* 1991. Pág. 14). Lo que llamó como poder de combinación, que desde otros autores de nombrado como unidades de atomicidad o grados de afinidad.

Basándose en el trabajo de A. Couper (1831-1896) y Kekulé hacia 1858, momento en donde ya estaba desarrollada la química orgánica estructural, Alexander Butlerov (1826- 1886) introdujo el término *estructura química* de la que afirma que esta, para cualquier molécula, queda definida por la naturaleza de las entidades que las compone, inclusive por los enlaces mutuos entre lo átomos. A este respecto, Couper en 1858 afirmaba que hay unas interacciones de tipo energético y que determinan cuando estas entidades se combinan, a lo que él llama “afinidad libre”. Enunciando una propiedad de “electropositividad y electronegatividad de las entidades. En este modelo, se relacionan estas entidades con estructuras similares:

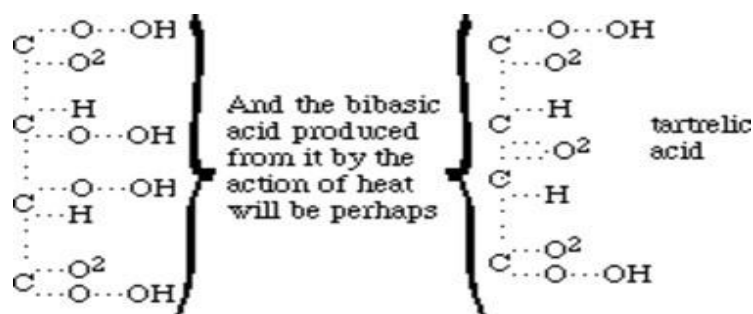


Figura 2. Estructura molecular de un sacárido donde ocurre la reacomodación de las entidades elementales para producir ácido tartárico. Tomado de: Philosophical Magazine 16, 104-116 (1858). as excerpted in Alembic Club Reprint #21, On a New Chemical Theory and Researches on Salicylic Acid. Pág. 116

No obstante, el marco conceptual consolidado hasta este punto no daba explicación de algunos fenómenos como los evidenciados por Louis Pasteur (1822-1895), que al estudiar cristales del ácido tartárico se dio cuenta que la conformación de formas diferentes del mismo cristal, hacían girar en maneras opuestas el plano de la luz polarizada. Pero, en 1874 Van't Hoff (1852-1911) a partir de la tetravalencia del carbono, consideró que las fórmulas moleculares y las representaciones de enlaces químicos no eran lo suficientemente explicativas en diferentes ámbitos de la química; por lo que enunció lo siguiente:

“Parece cada vez más que las actuales fórmulas constitucionales son incapaces de explicar ciertos casos en isomería; La razón de esto es quizás el hecho de que necesitamos una declaración más definitiva sobre las posiciones reales de los átomos. Si suponemos que los átomos están en un plano, como por ejemplo con alcohol de isobutilo donde las cuatro afinidades están representados por cuatro líneas en este plano que ocupa dos direcciones perpendiculares entre sí. A continuación, el metano (CH_4) (para iniciar con el caso más simple) dará las siguientes modificaciones isoméricas (las diferentes átomos de hidrógeno siendo reemplazados uno tras otro por grupos univalentes $\text{R}' \text{R}''$ etc.” (Van't Hoff, 1874)

Van't Hoff consideraba que habían interacciones de “afinidad” entre los átomos de hidrógeno y carbono dispuestas en el espacio sobre un plano. Estas “afinidades” son representadas con líneas, haciendo referencia a la unión química o enlace químico. Consideraba espacios y relaciones entre radicales de un compuesto orgánico $\text{R}' \text{R}''$ argumentando que estas podían cambiar de orientación, cambiando así la actividad óptica del compuesto. “Cuando las cuatro afinidades de los átomos de carbono son satisfechas por cuatro grupos univalentes que difieren entre sí, se obtienen más de dos tetraedros diferentes, uno de los cuales es la imagen reflejada del otro, no pueden ser superpuestas; Es decir, isómeros estructurales con actividad óptica diferente”. Van't Hoff (1874)

Si bien Van't Hoff pudo haber considerado realizar estas representaciones estructurales, sin atribuir un referente ontológico a la unión química, pensaba en espacios geométricos en donde se establecen las estructuras geométricas, atribuyéndoles carácter de “realidad”. A continuación se muestran algunas de las estructuras tomadas del artículo presentado:

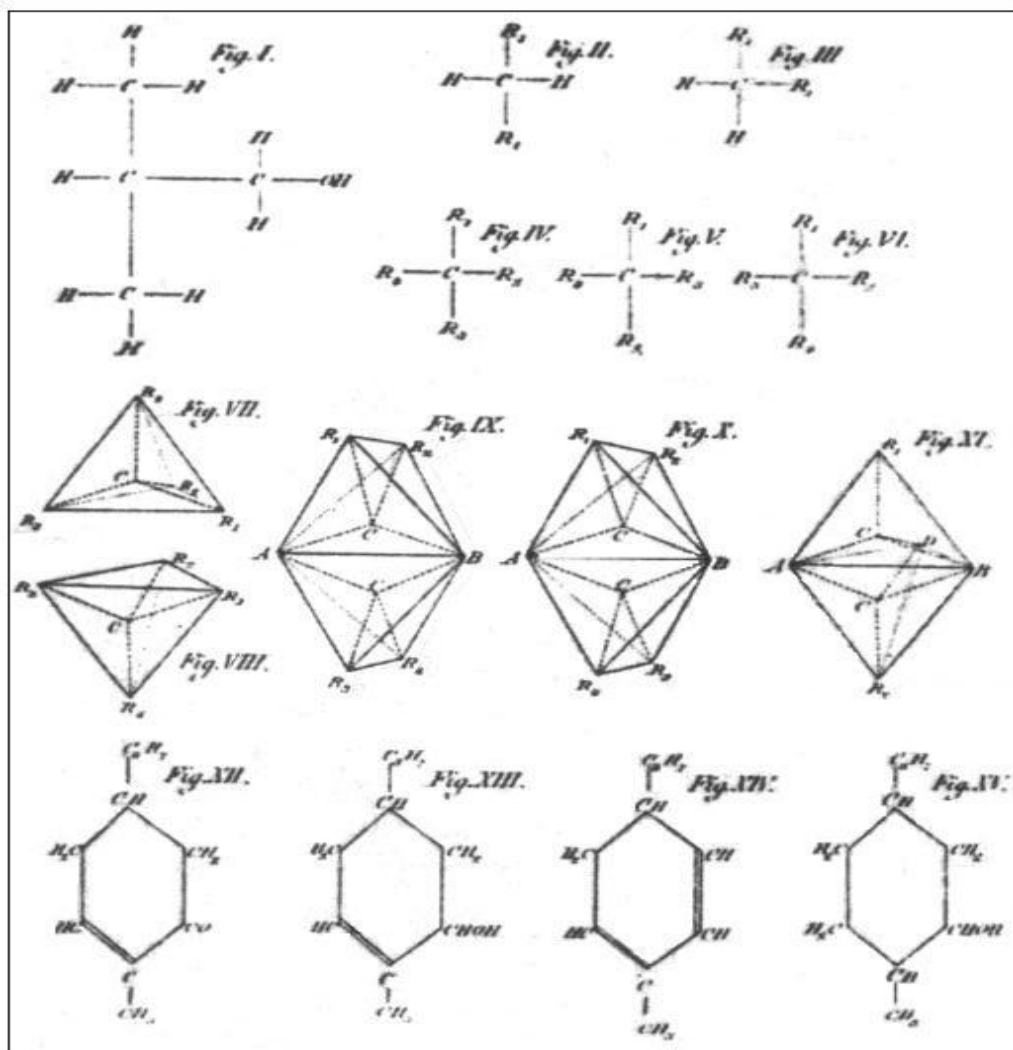


Figura 3. Estructuras moleculares geométricas de Van't Hoff. Tomado de: Jacobus Henricus van 't Hoff (1874). A suggestion looking to the extension into space of the structural formulas at present used in chemistry. And a note upon the relation between the optical activity and the chemical constitution of organic compounds. Archives neerlandaises des sciences exactes et naturelles vol. 9, pág. 454

Las ideas de van 't Hoff se extendieron hacia los finales del siglo XIX, donde ya estaban en juego los problemas que darían lugar al surgimiento de la teoría cuántica y que no tardarían en ser resueltos por los físicos del momento, dando un giro dramático a la concepción geometrizada de la realidad microscópica y las

entidades que la pueblan. Sin embargo, la idea de la concepción estructural molecular debida a la disposición de los átomos en el espacio de manera tridimensional, hasta el momento asienta la concepción estructural del enlace químico. No obstante, surgirían nuevas cuestiones sobre la naturaleza de las entidades que constituyen las entidades moléculas y las entidades enlaces químicos y la naturaleza de las fuerzas o interacciones que permiten la combinación química.

Dentro del trabajo del suizo Alfred Werner (1886-1919), se encuentra la teoría de la coordinación. Basándose en medidas realizadas por Svante Arrhenius (1859-1927) sobre la disolución de sustancias químicas y su capacidad para conducir electricidad, Werner concilia dos campos de la química aparentemente diferentes, la química de los complejos y la stereoquímica, a partir de la sistematización de explicaciones de comportamientos característicos de ambos campos desde la idea estructural.

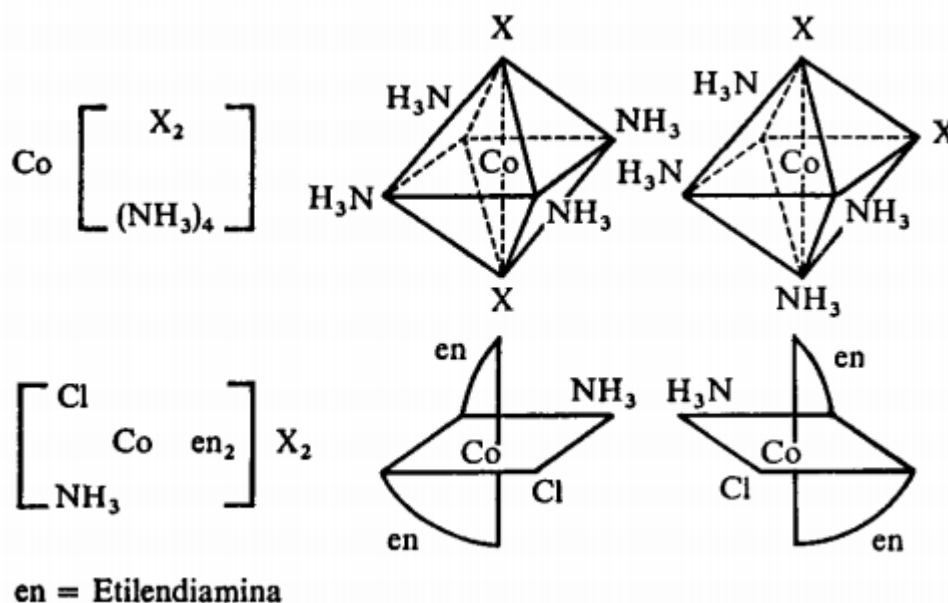


Figura 4. Diferentes compuestos moleculares isoméricos. Tomado de Garritz (1991). Estructura atómica, un enfoque químico. México D.F, México. Addison-Wesley Iberoamericana. Pág. 21.

Hasta este momento histórico no se da una respuesta contundente a los problemas mostrados anteriormente, por lo que retomando una cuestión que proclama Andoni Garritz, *et al.* (1991, pág. 21), se justifica la aparición de otros esquemas y marcos conceptuales que indaguen sobre la naturaleza de las entidades que conforman las moléculas y sus interacciones:

“...terminando el siglo XIX...la pregunta inicial: por qué los átomos presentan

valencias específicas, ha quedado sin respuesta. La clave habría que encontrarse en la naturaleza de las fuerzas que mantienen enlazados los átomos al enlazar moléculas, así que las respuestas a los interrogantes químicos que tendrían que esperar el desarrollo de la física atómica: el descubrimiento del electrón y el nacimiento de la teoría cuántica...”

Más adelante, en (1916), una vez desarrolladas las bases de la mecánica cuántica, Walter Kossel consideró al igual que Bohr, que el átomo puede ser representado con estructuras electrónicas en diferentes orbitas concéntricas en donde la interacción con otros átomos puede dar lugar a formación de enlace químicos de tipo iónico (Garritz, *et al* 1991). Por ejemplo, se considera la formación de cloruro de sodio:

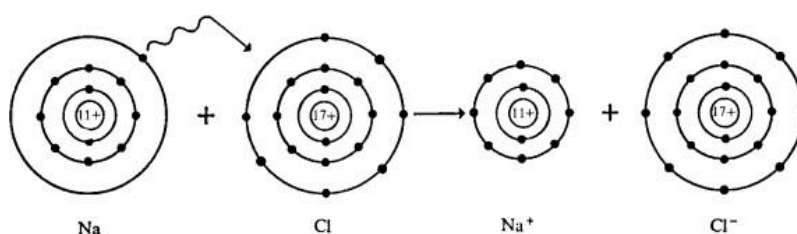


Figura 5. Representación del enlace iónico propuesto por Kossel en 1916. Tomado de: Garritz, *et al.* (1991). Estructura atómica. Un enfoque químico. Wilmington, DE, USA: Addison Wesley Iberoamericana

Por otro lado, Walter Kossel afirma que se basó en las características deducidas de los espectros de rayos Röntgen de los elementos, organizando una serie continua considerando que “la formación de moléculas es la unión de las estructuras electrónicas de diferentes átomos. Por lo tanto, vamos a generalizar las ideas que Helmholtz en su tiempo desarrolló en relación con cuantos elementales eléctricos”.

En este punto se empieza a considerar la influencia de la mecánica cuántica en la química y el enlace químico que permite explicar fenómenos y experimentos asociados a la radiación Garritz, *et al.* (1991), y se mantiene el estatus físico de los átomos que intervienen en la formación molecular. Así, dotando de partículas elementales localizadas, con espacios físicos en distancias respecto al núcleo. También la concepción de cantidades de fuerza que los núcleos ejercen sobre los electrones, pues Kossel sostiene que a menor distancia del núcleo mayor será la atracción. Se puede inferir en este punto que hay una fuerte tendencia de reduccionismo ontológico, pues en palabras de Kossel:

“Es esencial para nuestra teoría que en los procesos de este tipo cada posición de valencia, como se ve químicamente, tiene un “electrón de valencia” dispuesto en el átomo, pero la posición de valencia negativa específica, que está en el

halógeno en este caso, es tal vez para ser considerado como un " lugar libre " con respecto al elemento siguiente en el sistema periódico, que el átomo se esfuerza para llenar." (Kossel, 1916)

Este "esfuerzo" se refiere a parámetros de energía mínima del sistema, es decir estabilidad; motivo por el cual el átomo debe aceptar electrones de otro átomo y localizarlos en las orbitas de valencia, interpretando la valencia como una función eléctrica polar. Es claro que Kossel da un carácter material al átomo desde el modelo que plantea y por ende un carácter material al enlace químico. El concepto de valencia tiene como antecedente la ley de Abegg, enunciada por Richard Abegg que establece la cantidad de electrones que un átomo puede tener en su última orbita, $e = 8 - n$.

Ese mismo año, Gilbert N. Lewis (1875-1946), propone que en vez de que los electrones sean cedidos para "rellenar" las orbitas del modelo de Kossel, hubiese una compartición de electrones, permitiéndole al átomo alcanzar una estructura electrónica de gas noble. Por medio de del estudio de difracción de rayos X, Lewis propuso que los electrones son estáticos dentro de figuras cúbicas:

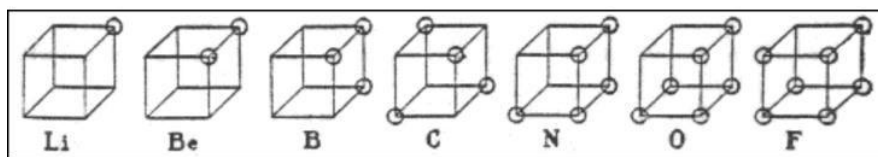


Figura 6. Modelo cúbico del átomo de Gilbert N. Lewis. Se observa que propone que los electrones estén en esquinas. Tomado de *The Atom and the Molecule* by Gilbert N. Lewis (1916). *Journal of the American Chemical Society* Volume 38, 1916, pages 762-786.

Lewis consideró que los enlaces iónicos se daban entre compuestos muy polares enunciando que algunos de ellos "deben renunciar a sus electrones para hacerse positivos" y los elementos que reciben estos electrones "tienen a formar grupos de 8".

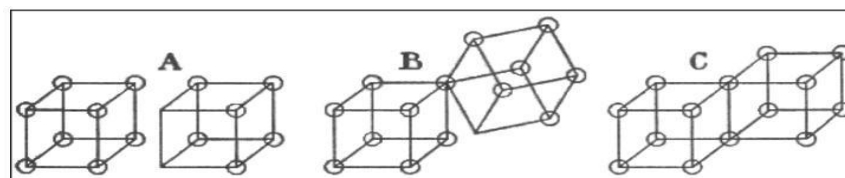


Figura 7. Enlace químico en las estructuras cúbicas de Lewis. Tomado de *The Atom and the Molecule* by Gilbert N. Lewis (1916). *Journal of the American Chemical Society* Volume 38, 1916, pages 762- 786.

Ahora, respecto a la estructura molecular, Lewis considera que la geometría de esta tiene influencia en la naturaleza del enlace, si es polar o menos polar:

“A pesar de la simetría de la forma de C, si los dos átomos por cualquier razón tienden a separarse los dos electrones en común puede aferrarse más firmemente a veces a uno de los átomos, a veces a la otra, lo que produce algunos disimetría en la molécula como un todo, y un átomo tendrá un ligero exceso de carga positiva, y el otro de negativo”. (Lewis, 1916)

Se puede afirmar que Lewis define la naturaleza del enlace químico pensando en distancias reales entre núcleos y electrones asumiéndolos como cuerpos. Si bien Lewis afirma que debe considerarse estos avistamientos cómo un modelo teórico que facilita la representación, el “imaginario” de la dinámica estructural de los enlaces del modelo hace referencia al uso de entidades “reales”.

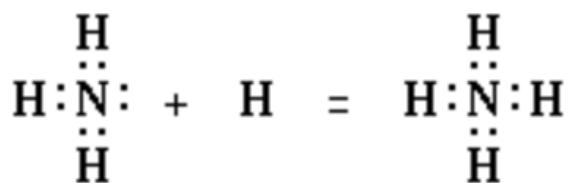


Figura 8. Enlace químico y octeto en estructuras de Lewis. Tomado de The Atom and the Molecule by Gilbert N. Lewis (1916). Journal of the American Chemical Society Volume 38, 1916, pages 762- 786.

Los trabajos mecánico cuánticos adelantados por Walter Heitler y Fritz London, retomaron la importancia a de los aportes de Pauling sobre el modelo teórico de enlace de valencia (TEV). Pero se incluían algunas mejoras que aumentaban la precisión en el cálculo de energías de enlace y radios atómicos. Estas mejoras corresponden a aumentar la complejidad de la expresión matemática de la función de onda total definiendo una función de onda para cada electrón por separado, luego valiéndose del de combinación lineal, por lo tanto:

$$\Psi = \Phi_a * \psi_b \quad (1)$$

Ψ es la función de onda de total que es equivalente a la multiplicación de las longitudes Φ y ψ de onda de la los electrones de 1S de cada átomo de hidrógeno donde a y b son los electrones respectivamente. Cabe resaltar que el trabajo de Pauling, se trataban funciones de onda independientes para cada electrón asumiendo menor deslocalización de los electrones encontrando un radio R finito

en el que la energía es óptima para el enlace, pues el electrón a y b están en lados opuestos de la molécula sin generar mayor interacción. (Goddard & Muller, 2002).

Este modelo se soporta en que la energía cinética y potencial dentro de los átomos participantes en el enlace químico, están en función de la distancia internuclear $K(r)$ y $V(r)$ de los cuales se consideran dos posibilidades de interacciones, orbitales enlazantes o antienlazantes. Heitler-London introducen una mejora en el modelo simple de valencia, considerando el efecto de la atracción de ambos núcleos en cada uno de los electrones, lo que permite considerar una mayor deslocalización. Entonces si se tratan por separado pero haciendo aditivas las funciones de onda de tal interacción, la ecuación de función de onda total empleando factores normalización, se debe ampliar así:

$$\Psi = c \Phi(a) * \psi(b) + k \psi(a) * \Phi(b) \quad (2)$$

Weisber menciona que el modelo Heitler-London de TEV permite mejor aproximación de los cálculos de energía de enlace de H/H y la distancia internuclear en respecto a los calculados experimentalmente.

Sin embargo, si se considera la combinación de orbitales atómicos concibiendo posiciones de los electrones a y b simultáneamente así los orbitales moleculares se obtiene que la probabilidad de la función de onda del electrón 1 $\psi(b)$, es dependiente de la probabilidad de la función de onda del electrón 2 $\Phi(a)$.

En la figura 8 se muestra la que los orbitales atómicos enlazantes y que se superponen para formar un orbital molecular tienen energía E_g que disminuye considerablemente cuando el radio es pequeño liberando energía, esto se conoce como estabilización del enlace. En la figura 8 se evidencia que E_u es la energía del orbital molecular antienlazante.

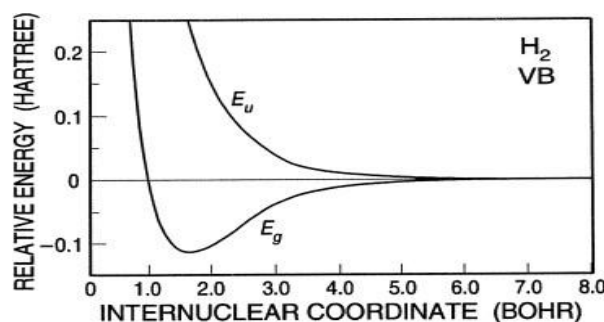


Figura 9. Gráfico de energía de funciones de onda para orbitales enlazantes g y antienlazantes u respecto al radio de Bohr. Tomado de (Goddard & Muller, 2002)

En cada uno de estos modelos se atribuye cierto poder explicativo, o más bien ciertos alcances y funcionalidad a la naturaleza de cada una de las entidades y que aparecen en la ontología a la que refieren. Sin embargo, los modelos basados en la teoría cuántica tienen un poder explicativo mayor que el de la química en cuestiones que tienen que ver con los “niveles internos de la materia y la realidad”. Por lo tanto, la concepción estructural del enlace químico que sigue siendo funcional hoy en día, se ve cuestionada desde los inicios de la teoría cuántica y del límite interteórico que aparece en los modelos TEV y TOM. Colocando así en tela de juicio, lo ontológico y lo epistemológico de la química estructural.

4. DELIMITACIÓN DEL PROBLEMA

La descripción de la naturaleza de las entidades que aparecen en la concepción estructural del enlace químico CEEQ, se ha visto ampliamente cuestionada por los supuestos provenientes de la mecánica cuántica. La definición del estado de una entidad elemental, en términos de las funciones de onda cuántica de los electrones en coordenadas esféricas polares, es una expresión matemática en la que se considera la energía total del sistema definida en términos de la energía cinética y potencial, la masa y el vector posición de los electrones. Por lo que al considerar el efecto de los demás electrones en el átomo y la atracción del núcleo y el principio de incertidumbre de Heisenberg, no puede mantenerse la idea de que los electrones sean completamente localizables, permitiendo afirmar que los orbitales atómicos carecen de referente ontológico, es decir que no son reales. Esto lleva a preguntarse ¿cómo puede sobrevivir la ontología de la concepción estructural del enlace químico a los preceptos teóricos de la mecánica cuántica?, o en términos de Del Re (1998): ¿cómo se puede sostener, ante los preceptos teóricos de la mecánica cuántica, el trabajo de los químicos acerca de la estructura del enlace químico y por consiguiente la concepción de que las moléculas tienen una estructura correspondiente a posiciones nucleares relativas fijas y por lo tanto una forma definida?

En la química cuántica se ha apropiado el tratamiento matemático mecánico cuántico para describir los atributos de los enlaces químicos en términos de energía cinética y energía potencial a una distancia internuclear (r). Los dos modelos teóricos que describen el enlace químico son la teoría del enlace de valencia (TEV) y la teoría del orbital molecular (TOM) (Goddard & Muller, 2002), en donde se emplea el método de aproximación de Hartree-Fock para describir el estado de los orbitales moleculares (Levine, 2001). Además, se considera que para cada átomo independiente que conforma una molécula, el cuadrado de las funciones de onda corresponde a la amplitud de probabilidad o densidad de probabilidad electrónica que representa la probabilidad de que un electrón e_1 esté en la posición r_1 y en determinada dirección, dándole un referente ontológico al orbital atómico. Este parámetro, es el que en química, permite explicar el modo en que los átomos se unen entre sí a través de los enlaces químicos, dándole una forma y un carácter de "existencia y realidad" a la concepción estructural del enlace químico (Lombardi & Labarca, 2011).

Desde este punto de vista, pareciera que la química cuántica legitima un referente objetivo para la concepción estructural del enlace químico, concepción que le ha concedido amplia autonomía epistemológica a esta ciencia. Dotándola de un carácter predictivo y organizativo, el cual ha permitido la estructuración del "andamiaje conceptual" de esta ciencia. Sin embargo, algunos investigadores como Eric Scerri (2000), afirma que los orbitales atómicos y los orbitales

moleculares no tienen referente ontológico, pues afirma que una función de onda de un orbital atómico es una “ficción matemática” y por lo tanto no existe, y el cuadrado de su módulo es la densidad de carga electrónica que sí podría ser observable por técnicas experimentales.

En el cruce interteórico que supone la química cuántica, bajo los modelos TEV y TOM, aparecen supuestos de reduccionismo ontológico y epistemológico. Como ya se ha mencionado anteriormente en este trabajo (Pág. 7), este hecho puede afectar el discurso propiamente químico del docente acerca del enlace químico y su concepción estructural. Esta problemática interdisciplinar entre la filosofía de la química y la formación de profesores, insta a indagar y diagnosticar las concepciones que tienen los docentes sobre el mundo del enlace químico y la concepción estructural del enlace, en miras de argumentar sobre la necesidad de una educación centrada o no alejada de la filosofía de la química.

Para ello resulta fundamental adentrarse en el análisis del discurso realista que subyace de los modelos teóricos clásicos y los modelos químico-cuánticos del enlace químico, asumiendo la posibilidad de establecer el estatuto ontológico de la concepción estructural del enlace químico CEEQ como una ontología múltiple, atendiendo a los fundamentos del realismo pluralista kantiano. De esta manera, se compara y se analiza un discurso químico que se asume como legítimo, autónomo e irreducible, con las concepciones que tienen los profesores de química en formación avanzada sobre la CEEQ.

4.1. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

La formulación del problema de esta investigación está compuesta de dos aspectos fundamentales que se integran para dar una pregunta que motiva la investigación: 1) el estatuto ontológico de la concepción estructural del enlace químico sostenido desde el realismo pluralista y, 2) las concepciones frente al ámbito ontológico que tienen los docentes en formación avanzada dentro del discurso referido al enlace químico como tópico central de la química. Por lo que se plantea la siguiente pregunta problema:

¿Qué consideraciones surgen sobre la inclusión de reflexiones filosóficas en la formación de profesores de química, a partir del diagnóstico de las ideas de docentes en formación avanzada acerca del enlace químico y la CEEQ?

5. OBJETIVOS

5.1. OBJETIVO GENERAL

Analizar las implicaciones y los significados que surgen del diagnóstico de las ideas que presentan los docentes en formación avanzada acerca del estatuto ontológico de CEEQ.

5.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Establecer el estatuto ontológico de la concepción estructural del enlace químico (CEEQ) a partir de la revisión de los modelos estructurales clásicos de la química y los modelos químico-cuánticos.
- Analizar la posibilidad de sostener el estatus ontológico de la CEEQ a partir de los presupuestos del realismo pluralista en respuesta a la posibilidad del reduccionismo ontológico a la física cuántica.
- Caracterizar las concepciones de los profesores en formación avanzada de la Maestría en Docencia de la Química de la Universidad Pedagógica Nacional acerca del enlace químico y su concepción estructural.
- Analizar la importancia de las reflexiones en el ámbito ontológico sobre el enlace químico y su concepción estructural, desde los supuestos del realismo pluralista.

6. METODOLOGÍA

6.1. PERSPECTIVA METODOLÓGICA

La metodología de esta investigación se enmarca dentro del paradigma epistemológico del *constructivismo*, centrado en una perspectiva teórica de la *hermenéutica*. De acuerdo con Crotty (1998) y Bautista (2011), dentro de los supuestos del constructivismo se admite que el conocimiento y el mundo es el resultado de la construcción y la reconstrucción de una realidad, que tiene su origen en la interacción del sujeto cognoscente y la realidad independiente o externa del sujeto.

Para esta investigación, que está basada en los presupuestos del pluralismo ontológico, los marcos conceptuales coexistentes del enlace químico describen y caracterizan una ontología y una estructura conceptual propia, que es producto de la interacción de estas estructuras y el mundo, teniendo la característica fundamental de no ser teorías-copia y caracterizaciones absolutas de la realidad. De manera similar, las versiones de mundo y los esquemas conceptuales del docente en formación avanzada (sujeto cognoscente) subyacen de la interacción de estos dos ámbitos, en los cuales juegan un papel muy importante objetos de la evidencia obtenidos en la experimentación y en datos estandarizados provenientes de las estructuras conceptuales del enlace químico.

Desde la perspectiva teórica de la hermenéutica, se entienden los modelos teóricos de la ciencia y sus ontologías como construcciones sociales, por lo que estas pueden ser analizadas de una manera crítica a partir del análisis del discurso y del contenido. En efecto, los modelos teóricos del enlace químico que refieren a la CEEQ, como las ideas de los docentes sobre CEEQ, son analizados desde la metodología del *Análisis del Discurso*, empleándose métodos e instrumentos de recolección de información para realizar un análisis diagnóstico del contenido. Alcanzando así el establecimiento del estatuto ontológico de CEEQ de los modelos teóricos como la versión o ideas de este estatuto de los profesores en formación avanzada.

6.2. POBLACIÓN Y MUESTRA

Se encuestó un grupo de 12 de docentes de química de los cuales 4 se encuentran cursando posgrados en Maestría en Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad Nacional de Colombia, 1 cursa la Maestría en Química Universidad Nacional de Colombia y 5 cursan Maestría en Docencia de la Química de la Universidad Pedagógica Nacional. De este grupo 2 de los encuestados son docentes en ejercicio del posgrado mencionado de la Universidad Pedagógica Nacional.

6.3. ETAPAS DE DESARROLLO

Etapa 1 [Fundamentación]: Se revisaron de los modelos teóricos de la química estructural y la química cuántica, a partir de las publicaciones originales acerca de la naturaleza del enlace químico.

Etapa 2 [Construcción de instrumentos estatuto ontológico]: A partir de los presupuestos teóricos filosóficos y presupuestos metodológicos, se diseñaron instrumentos de recolección de la información para establecer el estatuto ontológico de la concepción estructural del enlace químico, sometiendo ésta a un análisis desde los presupuestos teóricos de ontologías múltiples y el realismo pluralista.

Etapa 3 [Construcción e implementación del instrumento estatuto ontológico de los docentes]: Se realizó la construcción e implementación del instrumento de recolección de información para conocer las concepciones de los docentes en formación avanzada.

Etapa 4 [Análisis de resultados]: Se analizaron los instrumentos para el establecimiento de los estatutos ontológicos de los modelos teóricos que relatan sobre CEEQ. También se compararon con los instrumentos de recolección de información sobre las concepciones que tienen los profesores en formación avanzada de la maestría en Docencia de la Química sobre CEEQ.

6.4. REVISIÓN DE LOS MODELOS TEÓRICOS DE LA QUÍMICA ESTRUCTURAL Y LA QUÍMICA CUÁNTICA SOBRE CEEQ.

Los modelos científicos sobre la naturaleza del enlace químico que se analizan son los correspondientes a las publicaciones de la revista *Journal of American Chemical Society*, “The atom and the molecule” por Gilbert Newton Lewis en 1916 y “The structure of atoms and octet theory of valence”, por Irving Langmuir en 1919, “The nature of the chemical bond. Application of results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules”, por Linus Pauling en 1932.

En estas publicaciones, los autores mencionados presentan el objeto central del modelo teórico de enlace químico que proponen. En estas publicaciones se ponen en evidencia algunas de las bases teóricas que en dicho momento histórico soportan el modelo.

6.5. INSTRUMENTOS PARA LA RECOLECCIÓN DE DATOS.

A continuación, se presentan los instrumentos que permiten recolectar y analizar la información necesaria para establecer el estatuto ontológico de la CEEQ de los modelos teóricos seleccionados. También se presentan los instrumentos que permiten analizar y caracterizar el discurso de los docentes en formación avanzada relativo al estatuto ontológico de CEEQ.

6.6. INSTRUMENTOS PARA ESTABLECER EL ESTATUTO ONTOLÓGICO DE CEEQ.

Frente a las categorías que pueden estructurar una ontología, se adopta la posición de Lombardi & Pérez-Ransanz (2012), en donde se asume que estas categorías son elementos estructuradores básicos de una ontología y el lenguaje. Pues la totalidad de las categorías no están preestablecidas dentro de los supuestos del pluralismo ontológico de raigambre kantiana. Esto parte desde una de las condiciones fundamentales de esta postura de realismo pluralista, que en términos de Putnam (1975) sería: “la mente construye al mundo y el mundo construye a la mente”, que en este caso es para Kant, *evitar la falacia de la división*. Por lo tanto, no puede separarse o dividirse la realidad de un marco conceptual, pues las categorías de una ontología múltiple surgen y dependen de esta relación intrínseca.

Para este caso, las categorías dependen de los objetos trascendentales con los que puede comprometerse las teorías del enlace químico y sus marcos conceptuales como lo son los modelos teóricos clásicos de Lewis y Lagmuir y los modelos teóricos modernos como TEV y TOM. Sin embargo, deben proponerse unas categorías generales que permitan rastrear las categorías específicas de cada ontología, categorías básicas que irán surgiendo de acuerdo al análisis de los modelos teóricos. Estas categorías básicas de rastreo son: *Objetos/individuos, Propiedades y relaciones, Cambios, Causalidad y Leyes*. Cabe aclarar que algunas de estas categorías básicas pueden no pertenecer a alguna o algunas de las ontologías, y que tampoco posean un orden dado por alguna directriz referida a algún otro tipo de realismo (Anexo 1).

A partir de lo evidenciado en la revisión, es importante observar la concordancia que hay entre la <<estructura libre de las ontologías>> del realismo pluralista, puesto que la matriz de rastreo mostrada cambia para los modelos cuánticos. Pero varía de acuerdo a los presupuestos teóricos que sostienen la teórica cuántica respecto compromisos ontológicos distantes de las concepciones de “mundo clásico”.

6.7. INSTRUMENTOS PARA ANALIZAR LAS CONCEPCIONES QUE TIENEN LOS DOCENTES EN FORMACIÓN AVANZADA RESPECTO AL ESTATUTO ONTOLÓGICO DE CEEQ.

Se construyó una encuesta de 16 preguntas abiertas dirigida al grupo de docentes seleccionado. Con este instrumento se tiene la intención de indagar por concepciones del grupo de docentes en formación avanzada acerca de la ontología del enlace químico y la CEEQ, desde los modelos teóricos que ellos expresen conocer y emplear para generar explicaciones. El instrumento 3 (Anexo 2), está distribuido en 2 secciones. La primera sección que consta de 9 preguntas dirigidas al aspecto ontológico de los modelos teóricos estructurales y químico-cuánticos que explican el enlace químico. La segunda sección consta de 7 preguntas que están dirigidas al aspecto epistemológico referente a estos modelos teóricos.

La sección 1 contiene las preguntas 3, 4, 5, 6, 7, 10, 11, 12 y 13. En la pregunta 3 se indaga por las entidades que pueblan las ontologías referentes al enlace químico. La pregunta 4 se indaga por las propiedades de las entidades mencionadas anteriormente, en la pregunta 5 se indaga por las relaciones que existen entre entidades y propiedades, la pregunta 6 indaga por la causalidad de los enlaces químicos, en la pregunta 7 se indaga por los cambios que pueden ocurrir en los enlaces químicos, en la pregunta 10 se indaga por las propiedades periódicas que están asociadas al enlace químico, como propiedades-entidades, en 11 por las leyes que pueden regir el enlace químico, en la 12 por la estructura molecular y la relación con la dimensión pragmática y la pregunta 16 indaga por el estatus ontológico que tienen las entidades mencionadas por el docente en formación avanzada.

La sección 2 contiene las preguntas 1, 2, 8, 9, 14, 15 y 16. En las preguntas 1 y 2 se indaga por los modelos teóricos que el profesor en formación avanzada conoce que explican el enlace químico, en las preguntas 8 y 9 se indaga por las evidencias de entidades fenoménicas asociadas al enlace químico, en las preguntas 14, 15 y 16 se indaga por las concepciones de los docentes acerca de la funcionalidad de los modelos de enlace químico en cuestión, con la intención de encontrar argumentos que están asociados a la autonomía de la química y el enlace químico. Estos instrumentos se analizarán frente a las matrices ontológicas diseñadas anteriormente y los supuestos del realismo pluralista.

7. RESULTADOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS

7.1. MODELOS CLÁSICOS DEL ENLACE QUÍMICO: GILBERT NEWTON LEWIS E IRVING LANGMUIR.

En esta sección se analiza la tabla 2 empleada en la recolección de información obtenida de las publicaciones de la revista *Journal of American Chemical Society*, "The atom and the molecule" por Gilbert Newton Lewis en 1916 y "The structure of atoms and octet theory of valence", por Irving Langmuir en 1919. En estas

publicaciones, los autores mencionados presentan el objeto central del modelo teórico de enlace químico que proponen para lo cual ponen en evidencia algunas de las bases teóricas que en dicho momento histórico soportan el modelo.

Tabla 2. Instrumento de recolección de información para el establecimiento de ontologías de los modelos estructurales de enlace químico.

			Ontologías soportadas en la química estructural	
		Categorías de rastreo de elementos	G.N Lewis (1916) Modelo cúbico de enlace	Irving Lagmuir (1919) Modelo cúbico de enlace y teoría de valencia
Objetos trascendentales "X"		Entidades/individuos constituyentes de los enlaces químicos (Objetos empíricos)	NIVEL MOLECULAR • Entidades elementales o átomos: están conformados por un Shell y un Kernel. • Entidades moleculares: Unión o asociación de shells de entidades elementales con números menores y diferentes de 8 electrones. Pueden ser polares o no polares. • Entidades polares: poseen distribuciones de carga que generan momentos eléctricos. • Entidades extremadamente polares: poseen distribuciones de carga que generan momentos eléctricos fuertes. • Entidades no polares: no poseen distribuciones de carga que generan momentos eléctricos.	NIVEL MOLECULAR • Entidades elementales o átomos: están conformados por un Shell y un Kernel. En este caso describe al núcleo del kernel situado en una posición en un plano ecuatorial, donde los electrones se mueven, están estáticos, giran u oscilan alrededor de este, en un espacio denominado celda del Shell. Lagmuir (1919), propone con respecto al modelo atómico de Rutherford (1913), que varios Shell son esféricos y concéntricos con el kernel. • Entidades moleculares: Unión o asociación de shells de entidades elementales con números menores y diferentes de 8 electrones. Pueden ser polares o no polares.

Objetos trascendental es "X"		Intidades/individuos constituyentes de los enlaces químicos (Objetos empíricos)	• Entidades intermedias: poseen cierta polaridad y cierta no polaridad. Debido a un cierto dipolo o multipolo generado. NIVEL ELÉCTRICO • Electrón: Partícula cargada negativamente, entidad material. • Shell: Electrones de la capa más externa del átomo que rodean de alguna manera el Kernel. • Kernel: Núcleo atómico y electrones de capas internas.	• Entidades iónicas: entidades que tienen carga positiva o negativa debido a la ganancia o pérdida de electrones de en el Shell externo. No forman entidades moleculares. - Entidades extremadamente polares: poseen distribuciones de carga que generan momentos eléctricos fuertes. • Entidades covalentes: comparten electrones formando octetos en el Shell externo. - Entidades polares: poseen distribuciones de carga que generan momentos eléctricos. - Entidades no polares: no poseen distribuciones de carga que generan momentos eléctricos. • Entidades intermedias: poseen cierta polaridad y cierta no polaridad. Debido a un cierto dipolo o multipolo generado. NIVEL ELÉCTRICO
-------------------------------------	--	---	--	--

				• Electrón: Partícula cargada negativamente, entidad material. Cada electrón ocupa un espacio o celda en el Shell. Giran, se mueven, son estáticos u oscilan e dichas posiciones. • Shell: Capas esféricas de electrones que son concéntricas y que rodean el núcleo. Kernel: Núcleo atómico y electrones de shells o capas internas.
Marco o esquema conceptual		Propiedades -entidades de del enlace químico	Propiedades NIVEL MOLECULAR Entidades, moleculares polares, no polares e intermedias: • Polaridad positiva y negativa: debida a la fuerza de atracción electromagnética. • Fuerzas de atracción: capacidad de los núcleos de atraer electrones y fijar en el Shell o de compartir con el Shell de otra entidad elemental. Son fuerzas de naturaleza electromagnética. • Fuerzas de repulsión: capacidad de los electrones de atraer repeler en el Shell o de compartir con el Shell de otra entidad elemental. Son fuerzas de naturaleza electromagnética.	Propiedades NIVEL MOLECULAR Entidades, atómicas moleculares polares y no polares: • Polaridad positiva y negativa: debida a la fuerza de atracción electromagnética. Se genera por las cargas positivas que hay en el kernel. • Fuerzas de atracción: capacidad de los núcleos de atraer electrones y fijar en el Shell o de compartir con el Shell de otra entidad elemental. Son fuerzas de naturaleza electromagnética. • Fuerzas de repulsión: capacidad de los electrones de atraer repeler en el Shell o de compartir con el Shell de otra entidad elemental. Son fuerzas de naturaleza electromagnética.

			• Masa: extensión o cantidad. NIVEL ELÉCTRICO Electrón: • Carga: comportamiento electromagnético de la partícula • Masa: extensión. • Vibración: depende de las fuerzas que la afectan y masa que posee. • Absorción de radiación electromagnética: los electrones absorben radiación ultravioleta y emiten radiación visible. Kernel: • Inalterabilidad en reacciones químicas: mantiene el número ordinal de cargas positivas en el núcleo. • Carga: comportamiento electromagnético de las partículas que lo componen. • Masa. • Fuerza de atracción: fuerza electromagnética que permite mantener electrones del Shell, atraer otros electrones	• Masa: extensión o cantidad. NIVEL ELÉCTRICO Electrón: • Carga: comportamiento electromagnético de la partícula. • Masa. • Vibración: depende de las fuerzas que la afectan y masa que posee. • Absorción de radiación electromagnética: los electrones absorben radiación ultravioleta y emiten radiación visible. Kernel: • Inalterabilidad en reacciones químicas: mantiene el número ordinal de cargas positivas en el núcleo. • Carga: comportamiento electromagnético de las partículas que lo componen. • Masa. • Fuerza de atracción: fuerza eléctrica que permite mantener electrones del
--	--	--	---	---

			de otros Shell. Esta fuerza depende de la naturaleza del elemento químico a la que pertenezca. • Absorción de radiación electromagnética: los <<átomos>> absorben radiación infrarroja del espectro infrarrojo lejano. Shell: • Alterabilidad en reacciones químicas: comparte o retira electrones de otro Shell, según la fuerza de la atracción. • Carga: comportamiento electromagnético de las partículas que lo componen. • Masa. • Absorción de radiación electromagnética: los <<átomos>> absorben radiación infrarroja del espectro infrarrojo lejano. • Fuerzas de repulsión: capacidad de los electrones de atraer repeler en el Shell o de compartir con el Shell de otra entidad elemental. Son fuerzas de naturaleza electromagnética. • Absorción de radiación electromagnética: los <<átomos>>	Shell, atraer otros electrones de otros Shell. Esta fuerza depende de la naturaleza del elemento químico a la que pertenezca. • Absorción de radiación electromagnética: los <<átomos>> absorben radiación infrarroja del espectro infrarrojo lejano. Shell: • Alterabilidad en reacciones químicas: comparte o retira electrones de otro Shell, según la fuerza de la atracción. • Carga: comportamiento electromagnético de las partículas que lo componen. • Masa. • Absorción de radiación electromagnética: los <<átomos>> absorben radiación infrarroja del espectro infrarrojo lejano. • Difracción de rayos X.
--	--	--	--	---

			absorben radiación infrarroja del espectro infrarrojo lejano. • Difracción de rayos X.	
		Relaciones entre entidades	1. EN EL NIVEL MOLECULAR • De entidades polares con entidades polares: Interaccionan, cambiando su polaridad. • De entidades polares con entidades intermedias: las entidades polares interaccionan entidades intermedias generando cambios en su polaridad. 2. EN EL NIVEL ELÉCTRICO • De electrón con electrón: interactúa con otros electrones generando fuerzas de repulsión. • De Shell con Shell: Electrones de la capa más externa del átomo son interpenetrables, haciendo así pertenecer electrones a las conchas de los átomos del enlace. Según el postulado 4 de Lewis (1916).	1. EN EL NIVEL MOLECULAR • De entidades polares con entidades polares: interaccionan, cambiando su polaridad. De estas interacciones surgen propiedades físicas presentadas en Langmuir (1919). Estas dependen de los electrones del Shell externo. • De entidades polares con entidades intermedias: las entidades polares interaccionan entidades intermedias generando cambios en su polaridad. De estas interacciones surgen propiedades físicas presentadas en Langmuir (1919). Estas dependen de los electrones del Shell externo. EN EL NIVEL ELÉCTRICO • De electrón con electrón: interactúa con otros electrones generando fuerzas de repulsión. • De Shell con Shell: Electrones de la capa más externa del átomo son interpenetrables, haciendo así pertenecer electrones a las conchas de los átomos del enlace. Según el postulado 4 de Lewis

			• De Shell con Kernel: Núcleo atómico y los electrones del Shell interactúan, manteniendo el postulado 4 de Lewis (1916).	(1916). De estas interacciones surgen propiedades químicas presentadas en Langmuir (1919). • De Shell con Kernel: Núcleo atómico y los electrones del Shell interactúan, manteniendo el postulado 4 de Lewis (1916). De estas interacciones surgen propiedades químicas presentadas en Langmuir (1919).
--	--	--	--	---

		Causalidad de los enlaces químicos	1) Fuerzas de atracción y repulsión que NO cumplen con las leyes de atracción electromagnéticas macroscópicas, $F = (Q_2 \cdot Q_1) / r^2$. Este tipo de interacción a nivel molecular son responsables de que los electrones de los Shell interactúan con los Kernel de los átomos participantes de acuerdo con las características y propiedades-entidades establecidas anteriormente. En consecuencia, estos electrones, considerados de valencia por Lewis basándose en el trabajo de Abegg (1904), son compartidos por los Shell de las entidades atómicas del enlace. 2) Según Lewis (1916), se generan nuevos enlaces químicos cuando una molécula con trabajo de romper" las fuerzas electromagnéticas que mantienen los enlaces químicos, completándose así cada átomo participante con el número ordinal ocho (8) de electrones; ocupando cada electrón una esquina del Shell "cúbico".	1) Actúan fuerzas electroestáticas generadas por atracción de cargas. Se apoya en Lewis (1916). 2) Según Langmuir (1919), se generan moléculas cuando los pares electrónicos son atraídos por los núcleos de los kernel constituyentes de la molécula. Formando pares electrónicos hasta alcanzar un número de electrones igual a ocho (8) ocupando cada electrón una esquina del Shell "cúbico".
--	--	---	--	---

		Cambios en las entidades del enlace químico	NIVEL MOLECULAR • Entidades moleculares: Los cambios en la composición química dependen de la condición de estabilidad de la molécula. Lewis (1916), afirma que los medios en los cuales se encuentran las moléculas, generan cambios en la polaridad de estas. Generando dipolos y multipolos. • Entidades polares: debido al medio en que se encuentren pueden cambiar su polaridad. • Entidades intermedias: al poseer cierto carácter polar, en un determinado medio pueden presentar cambios en su polaridad. NIVEL ELÉCTRICO • Electrón: pueden pertenecer a un Shell diferente en el enlace químico presentando tautomerismo. Shell: cambian el número de electrones que lo conforman.	NIVEL MOLECULAR • Entidades moleculares: Los cambios en la composición química dependen de la condición de estabilidad de la molécula. Lewis (1916), afirma que los medios en los cuales se encuentran las moléculas, generan cambios en la polaridad de estas. Generando dipolos y multipolos. • Entidades polares: debido al medio en que se encuentren pueden cambiar su polaridad. • Entidades intermedias: al poseer cierto carácter polar, en un determinado medio pueden presentar cambios en su polaridad. NIVEL ELÉCTRICO

				• Electrón: pueden pertenecer a un Shell diferente en el enlace químico presentando tautomerismo. • Shell: cambian el número de electrones que lo conforman.
		Leyes de los enlaces químicos	• Ley Periódica de los elementos químicos: los elementos químicos están organizados en columnas de acuerdo a sus propiedades, hecho que coincide con un número polar común dentro del grupo. (valencia) • “Regla o ley del octeto”: en este modelo se generaliza esta condición o acuerdo para todos los compuestos. Se puede asumir que por la ley de periodicidad los elementos de un grupo tienen una o unas valencias o números polares en común. .	• Ley Periódica de los elementos químicos: los elementos químicos están organizados en columnas de acuerdo a sus propiedades, hecho que coincide con un número polar común dentro del grupo. (valencia) • “Regla o ley del octeto”: en este modelo se generaliza esta condición o acuerdo para todos los compuestos. Se puede asumir que por la ley de periodicidad los elementos de un grupo tienen una o unas valencias o números polares en común.

7.2. ENTIDADES O INDIVIDUOS CONSTITUYENTES DE LOS ENLACES QUÍMICOS, ENTIDADES-PROPIEDADES, RELACIONES Y CAUSALIDAD EN LOS MODELOS CLÁSICOS DE ENLACE QUÍMICO.

La categoría de *entidades o individuos constituyentes*, se ha establecido como la categoría principal de las cuales subyacen otras categorías de menor jerarquía ontológica. Estas entidades aparecen a partir de la síntesis entre supuestos teóricos y evidencias de objetos empíricos o fenoménicos, condición del realismo pluralista.

Respecto a estos modelos teóricos de enlace químico, en primer lugar, Langmuir (1881-1957) en la publicación de 1919 “The Structure Of Atoms And Octet Theory Of Valence” retoma el trabajo de Lewis sobre la estructura cúbica de los átomos y el enlace químico y propone la teoría de “covalencia” como una “extensión” del modelo de Lewis. Consolidando así una propuesta en donde se hace una descripción de la naturaleza química del enlace químico.

En segundo lugar, por su lado, Lewis plantea que la naturaleza química del enlace químico obedece a supuestos propios del átomo químico. G.N Lewis (1913), llevó a cabo su investigación sobre la polaridad y la no polaridad de sustancias químicas como una propuesta de clasificación de las sustancias en dos grupos como son sustancias orgánicas y sustancias inorgánicas, a partir del comportamiento de estas en diferentes medios polares. Lewis afirma que las sustancias químicas son polares o extremadamente polares, pero más adelante supondría que algunas sustancias químicas presentaban comportamientos intermedios, es decir carácter polar y no polar, dando una idea de la naturaleza electromagnética de las interacciones químicas. Estas interacciones son particulares para determinadas entidades atómicas y similares en ciertos grupos de estas entidades, las cuales se relacionan dando surgimiento a entidades moleculares. En términos de Zeidler (2000), siendo estas entidades plasmadas como representaciones que contienen información útil sobre algunas propiedades de entidades moleculares. Langmuir (1919, Pág. 257) desarrolló el supuesto de que muchas de las propiedades químicas y físicas de los compuestos químicos, están asociados a la estructura molecular.

Dentro del contexto del realismo pluralista, los objetos fenoménicos o empíricos de los cuales se refiere G.N Lewis e I. Langmuir, se pueden apreciar en la primera categoría del de la tabla 2. Estos son: entidades elementales o átomos, entidades moleculares, entidades polares, entidades extremadamente polares, entidades no polares y entidades intermedias en cuanto a su polaridad-no polaridad. Estas entidades mencionadas corresponden al grupo de las entidades que pueblan el nivel estructural molecular (basándose en Jensen, 1998). En el nivel eléctrico: electrón, Shell y Kernel.

Para Lewis, los electrones son entidades que tienen *propiedades-entidades* como masa, y otras propiedades como la carga eléctrica, la absorción de radiación y la vibración. Es decir que de estos objetos fenoménicos que propone en su modelo del átomo cúbico, se tiene la pretensión de que su estatus es el de ser objetos materiales, partículas físicas. El Kernel es una entidad que posee cargas positivas “correspondientes en un número ordinal al número atómico de la tabla periódica” (Lewis, 1916. Pág. 768). El Shell, es otra entidad que posee electrones que están distribuidos en algún lugar del espacio. Aunque Lewis emplea una distribución cúbica para su representación, en acuerdo con los términos de Herreño, Gallego y Pérez (2009), esta constituye solo un modelo icónico o gráfico que denota los electrones de la capa externa o Shell. Las líneas que se proyectan en el modelo icónico de cubo que describe el Shell, hacen referencia a una interacción de fuerzas que hay entre partículas del Shell y la posible dirección efectiva de estas. No a entidades materiales conocidas en la literatura química empleada en secundaria y primeros semestres universitarios como “sticks”.

Por su parte, el Kernel es una entidad que posee cargas positivas en cantidad igual al número ordinal número atómico que le corresponde a cada átomo en la tabla periódica. Sin embargo, en Lewis (1919), el Shell se describe como “la última capa o capa externa del átomo” lo que implica que el Kernel posee otros Shells o conchas donde se encuentran las demás entidades electrones (particulares, partículas individuos). Langmuir (1919), describe estas tres entidades del nivel eléctrico, como acá se han clasificado) apoyándose en los seis postulados del átomo cúbico de G.N Lewis (Lewis, 1916. Pág. 768). Sin embargo presenta una descripción “más amplia” de estas entidades desde una postura física, comprometiéndose ontológicamente con características espaciales de simetría como ángulos, planos y un eje de rotación (Langmuir, 1919. Pág. 252).

Entonces, la discusión está alrededor de ¿son entidades reales estos objetos fenoménicos o empíricos? ¿Cómo refiere este modelo a la estructura del enlace químico?

Es importante resaltar que estas entidades que surgen de marcos conceptuales que se construyen con las evidencias de los objetos empíricos de su “mundo” (y viceversa) tienen característica de individuos particulares, diferenciados de las demás entidades en este nivel principal de las ontologías mencionadas. Pero, se debe hacer una primera precisión, la de que estas entidades no son objetos a los que se tiene acceso con simple observación o con artefactos tecnológicos del momento histórico en el cual se gestaron estos esquemas conceptuales y visiones del mundo químico. Más allá de la discusión filosófica a la que se ha entrado en los últimos años, sobre la observación de entidades a estos niveles referidos de la química es de importancia afirmar, en este momento, que las entidades mencionadas anteriormente son objetos fenoménicos que tienen un carácter de entidad teórica, de las cuales se tienen evidencias que son interpretadas con un modelo teórico.

Entonces así, para dar respuesta a la primera pregunta, un camino es evocar condiciones y aspectos centrales del Realismo Pluralista: cuarta condición: “La

democracia teórico observacional” que proponen Lombardi & Pérez –Ranzans (2011) sobre el estatus ontológico que poseen las entidades no observables frente a las entidades observables accesibles con la observación directa: ambos tipos de entidades poseen el mismo estatus ontológico. Esto debido a que las entidades de estas ontologías están constituidas a partir de un marco conceptual y la interacción en medio de la realidad externa (Lobardi & Pérez-Ranzans, 2011. Pág. 101). A demás, esto se enlaza con la primera condición: “Raíces kantianas”. Pues la realidad a la que se refiere una ontología plural, tiene tres ámbitos importantes: un objeto trascendental “X”, el sujeto cognoscente y un esquema conceptual. Desde esta perspectiva, las entidades teóricas tienen un “alto” estatus ontológico porque son producto de la construcción de mundo del <<triple>> mencionado anteriormente, siendo el objeto empírico o fenoménico del cual se tienen evidencias de su existencia. Sin embargo, esto no significa que el objeto trascendental y su naturaleza última sean absolutamente descritas con la descripción que se hace para el objeto fenoménico; lo es igual para los objetos a los cuales se tiene acceso directamente desde los sentidos.

Esto lleva a rechazar la postura de “instrumentalizar” las entidades teóricas, en acuerdo con la óptica de Grover Maxell (1962) en “The ontological estatus of theorical entities”. Las entidades teóricas no son solo instrumentos útiles para organizar enunciados de observación y producir resultados deseados. Desde lo expuesto por Popper (1991), la concepción instrumentalista deslegitima el papel de las teorías en cuanto a la descripción del mundo y los aspectos que lo caracterizan. Si se aceptase esta postura de instrumentalismo para los esquemas conceptuales o teóricos del enlace químico que acá se estudian, se recaería en deslegitimar la realidad externa de los compromisos Kantianos del realismo internalista, llevando a suponer que el enlace químico y su estructura es << una ficción útil>>. Los propios enunciados o condiciones del Realismo Pluralista, rechazan esta concepción.

Esto nos permite entrar en la discusión que da una posible respuesta a la segunda pregunta planteada en este apartado, pregunta que se enmarca dentro del nivel estructural molecular. De esta manera, cabe resaltar que en primer lugar, Langmuir asume compromisos ontológicos frente a una concepción estructural del enlace químico, que tiene su explicación en las interacciones que se dan en el nivel eléctrico y que están relacionadas con la categoría de *causalidad del enlace químico* dentro de la ontología del modelo (Tabla 2). Langmuir (1919, Pág. 257- 258), afirma que las propiedades químicas de una entidad molecular “dependen de la fuerza con la que interaccionan los electrones de los Shell con las cargas de los kernel”. Respecto a las propiedades físicas, afirma que “dependen de las fuerzas entre las moléculas, y esta naturaleza depende del ordenamiento o arreglo espacial de los electrones del último Shell”. Resultaría curioso mencionar que desde Langmuir se supone un tipo de emergentismo, “emergentismo de entidades-propiedades físicas” del nivel eléctrico de la estructural de la química; nivel en el que el arreglo espacial de los Shell y los Kernel determinan las relaciones polares y no polares asociadas a las propiedades físicas. Cuestión que desde el pluralismo ontológico se rechazaría,

así como el emergentismo ontológico de la química a partir de las entidades propias de la física. En efecto, Langmuir compara algunas propiedades físicas de las moléculas de N_2O y CO_2 , y analiza las similitudes y diferencias de sus estructuras moleculares provenientes de “la teoría del octeto de valencia”

	N_2O	CO_2
Critical pressures.....	75	77 atmos.
Critical temperatures.....	35.4°	31.9°
Viscosity at 20°C.....	148×10^{-6}	148×10^{-6}
Heat Conductivity at 100°C.....	0.0506	0.0506
Density of Liquid at -20°.....	0.996	1.031
Density of Liquid at +10°.....	0.856	0.858
Refractive index of liquid. D line, 16°C.....	1.193	1.190
Dielectric constant of liquid at 0°.....	1.598	1.582
Magnetic susceptibility of gas at 40 atmos. 16°C.....	0.12×10^{-6}	0.12×10^{-6}
Solubility in water 0°.....	1.305	1.780
Solubility in alcohol at 15°.....	3.25	3.13

Tabla 3. Propiedades físicas de los compuestos N_2O y CO_2 tomada de Langmuir (1919). El autor toma los datos de Landolt-Börnstein y Abegg.

Posteriormente, Langmuir (1919) compara las estructuras moleculares que en la representación se proyectan por los enlaces químicos y los pares no-enlazantes de estas dos moléculas. El punto de congelación es una propiedad que también compara y según Langmuir, depende de la estructura molecular, teniendo los valores -102° C para N_2O y -96° C para CO_2 . No obstante, estos dos compuestos químicos tienen valores un tanto diferentes, en lo que Langmuir (1919. Pág. 258) afirma que “las evidencias parecen indicar que la molécula de CO_2 es ligeramente más simétrica, y tiene un campo de fuerza un poco más ligero que el campo de fuerza de N_2O “.

Para Langmuir, hay una concepción estructural de los enlaces químicos, conformada por sus entidades constituyentes, estando dispuestas en un espacio geometrizado o euclídeo. De ahí que Langmuir simboliza la estructura molecular como proveniente y relativa al resultado del arreglo completo de la estructura de los enlaces químicos desde una perspectiva ontológica y epistemológica de la física.

Desde Lewis, se puede admitir que él se compromete con entidades constituyentes del enlace químico como las mencionadas en las categorías *entidades o individuos constituyentes y propiedades-entidades*, y denota que estas primeras entidades tienen disposición fija en el espacio, pero no afirma que haya una disposición geométrica matematizada entre las entidades constituyentes como lo hace Langmuir; solo establece un modelo simbólico desde <<la concepción del átomo cúbico>>. No obstante, se puede afirmar que Lewis concibe la existencia de estas entidades y sus propiedades en un espacio euclídeo, proveniente de una fundamentación intuitiva espacio-temporal. Así, los argumentos emergentistas y reduccionistas a la física clásica, condenarían al

enlace químico y la estructura molecular de la química a ser el “derrotado en el debate” por esa afirmación.

No obstante, las bases kantianas del realismo pluralista solucionan esta “sentencia”, llevando a pensar que es un problema más bien del lenguaje de la química al referirse a entidades en química, que en la existencia de estas. Es decir, que muchas veces se requieren términos del marco conceptual de la física para referirse a entidades de la química, dándoles carácter ontológico del mundo físico. Esto lleva a pensar que el hecho de que la física clásica sea una ciencia notoriamente más antigua que la química, con fundamentos intuitivos espacio-temporales euclidianos (Cárdenas, 2004), cuyos supuestos fundamentaron las nociones de mundo macroscópico, pueden ser los responsables de que los químicos del siglo XIX y XX construyan ontologías de la química a nivel molecular y eléctrico en un marco físico. Por lo tanto, esto no garantiza que las entidades trascendentales o nouménicas tengan una correspondencia directa con el lenguaje de la física o de otras ciencias, como en el caso de otras entidades y propiedades como las subyacentes de la naturaleza eléctrica de la materia. Simplemente se establecen objetos fenoménicos desde la “óptica conceptual de la química”, así como lo puede hacer la física, pero cada objeto fenoménico o empírico de cualquiera de estos marcos, tiene como sustrato un objeto o un conjunto de objetos trascendentales. Por ejemplo, Lewis y Langmuir interpretaron lo que se conoce como carácter eléctrico de la materia de una manera particular, y esto les permitió montar el andamiaje conceptual químico de sus propuestas.

Así, Lewis y Langmuir (este último desde una visión más fiscalizada espacio-temporalmente) admite compromisos ontológicos con la naturaleza eléctrica de estas entidades que describen la *causalidad y las relaciones entre entidades* como interacciones que dan origen a la polaridad-no polaridad de los enlaces, que refiere a la atracción entre los kernel y los electrones que completan el octeto de los Shell. Dando así explicación del comportamiento de sustancias químicas en estado sólido dentro de un contexto químico.

Hasta este punto se tiene una noción de CEEQ desde los modelos clásicos, que son funcionales para explicar algunos comportamientos químicos. También, desde este punto, las ontologías de Lewis y Langmuir son diferentes, así epistemológicamente hayan acuerdos en común. Ahora, esto abre el camino a discutir sobre la ontología que propone la química cuántica sobre el enlace químico y que pone en tela de juicio a CEEQ por la precisión, el determinismo y la funcionalidad de su aparato conceptual. Sin embargo, el enlace químico y la estructura molecular siguen siendo la piedra angular de la defensa de la química como ciencia autónoma, ante el reduccionismo y el emergentismo ontológico.

7.3.RESULTADOS Y ANÁLISIS DE MODELOS QUÍMICO - CUÁNTICOS TEV Y TOM.

			Ontologías soportadas en la química estructural	
		Categorías de rastreo de elementos	Teoría del Enlace de Valencia TEV	Teoría del orbital Molecular TOM
Objetos trascendentales "X"		Entidades duales constituyentes de los enlaces químicos (Objetos empíricos o fenoménicos)	NIVEL MOLECULAR • Entidades elementales o átomos: están conformados por electrones, orbitales y núcleos atómicos. • Entidades moleculares: entidades polielectrónicas asociadas por pares de electrones enlazantes. NIVEL ELÉCTRICO • Electrón: onda-partícula cargada negativamente, entidad material-onda. • Núcleos atómicos: partículas masa en reposo. • Orbital enlazante: orbital en el que la función de onda Ψ' total tiene una energía baja a un bajo valor de radio a óptimo.	NIVEL MOLECULAR • Entidades elementales o átomos: están conformados por electrones, orbitales y núcleos atómicos. • Entidades moleculares: entidades polielectrónicas asociadas pares de electrones que ocupan un nuevo orbital (orbital molecular). NIVEL ELÉCTRICO • Electrón: onda-partícula cargada negativamente, entidad material-onda. • Núcleos atómicos: partículas masa en reposo. • Orbital enlazante: orbital en el que la función de onda Ψ'' tiene características de un nuevo orbital con función de onda una energía baja a un bajo valor de radio a óptimo.

 Objetos trascendental es "X"		Entidades duales constituyent es de los enlaces químicos (Objetos empíricos o fenómenico s)	• Orbital antianlzante: Orbital en el que la función de onda Ψ' total tiene una energía alta a un bajo valor de radio a. • Cuánto de materia: "extensión" de materia es discontinua con comportamiento dual onda corpúsculo. • Cuánto de energía radiante: "extensión" o paquete de energía con comportamiento dual onda corpúsculo. • Cuánto de luz: onda-partícula conocida como fotón.	• Orbital enlazante: orbital en el que la función de onda Ψ'' tiene características de un nuevo orbital con función de onda una energía alta a un bajo valor de radio a óptimo. • Cuánto de materia: "extensión" de materia es discontinua con comportamiento dual onda corpúsculo. • Cuánto de energía radiante: "extensión" o paquete de energía con comportamiento dual onda corpúsculo. • Cuánto de luz: onda-partícula conocida como fotón.
---	---	---	---	--

			Propiedades	Propiedades
Marco o esquema conceptu al		Propiedades -entidades de del enlace químico	NIVEL MOLECULAR	NIVEL MOLECULAR
			• Entidades elementales o átomos: están localizados en un lugar puntual en el espacio. En este modelo no se mueven. • Entidades moleculares: están localizadas en una región probabilista de espacio. En este modelo rotan y pueden estar en varios estados orientados hacia una coordenada polar φ. • Susceptibilidad paramagnética: las entidades moleculares son susceptibles en un campo magnético semi-clásico (punto de una región del espacio). • Núcleos atómicos: partículas en reposo, carga positiva.	• Entidades elementales o átomos: están localizados en un lugar puntual en el espacio. En este modelo no se mueven. • Entidades moleculares: están localizadas en una región probabilista de espacio. En este modelo rotan y pueden estar en varios estados orientados hacia una coordenada polar φ. • Susceptibilidad paramagnética: las entidades moleculares son susceptibles en un campo magnético semi-clásico (punto de una región del espacio). • Núcleos atómicos: partículas en reposo, carga positiva.
			NIVEL ELÉCTRICO	NIVEL ELÉCTRICO
			• Electrón: masa, carga, energía en reposo, masa en reposo. • Orbital enlazante: orbital en el que la función de onda Ψ' total tiene una energía baja que puede ser perturbado y cambiar sus valores.	- Electrón: velocidad de la luz, masa en reposo y energía en reposo, masa en movimiento y energía en movimiento. - Orbital enlazante: orbital en el que la función de onda Ψ' total tiene una energía baja que puede ser perturbado y cambiar sus valores.

Marco o esquema conceptual			• Cuánto de materia: “extensión” de materia que es discontinua con comportamiento dual onda corpúsculo. • Cuánto de energía radiante: “extensión” o paquete de energía con comportamiento dual onda corpúsculo. • Cuánto de luz: velocidad de la luz, masa en reposo y energía en reposo, masa en movimiento y energía en no-reposo.	• Cuánto de materia: “extensión” de materia que es discontinua con comportamiento dual onda corpúsculo. • Cuánto de energía radiante: “extensión” o paquete de energía con comportamiento dual onda corpúsculo. • Cuánto de luz: velocidad de la luz, masa en reposo y energía en reposo, masa en - movimiento y energía en no-reposo.
-----------------------------------	--	--	---	--

			Propiedades NIVEL MOLECULAR • Entidades elementales o átomos: Interaccionan a campo magnético y eléctricos posos de potencial. • Entidades moleculares: pueden perturbar otras moléculas cambiando las condiciones energéticas cambiando coordenada polar φ y función de onda. • Susceptibilidad paramagnética: las entidades moleculares son susceptibles en un campo magnético semi-clásico (punto de una región del espacio).	Propiedades NIVEL MOLECULAR • Entidades elementales o átomos: Interaccionan a campo magnético y eléctricos posos de potencial. • Entidades moleculares: pueden perturbar otras moléculas cambiando las condiciones energéticas cambiando coordenada polar φ y función de onda. • Susceptibilidad paramagnética: las entidades moleculares son susceptibles en un campo magnético semi-clásico (punto de una región del espacio).
--	--	--	--	--

Relaciones
entre entidades
duales.

			NIVEL ELÉCTRICO • Electrón: interactúa con los cuantos de luz y radiación cambian su longitud de onda y frecuencia. • Orbital enlazante: orbital en el que la función de onda Ψ' total tiene una energía baja que puede ser perturbado y cambiar sus valores. • Cuánto de luz: “colisiones” a la velocidad de la luz, a ciertas frecuencias.	NIVEL ELÉCTRICO • Electrón: interactúa con los cuantos de luz y radiación cambian su longitud de onda y frecuencia. • Orbital enlazante: orbital en el que la función de onda Ψ' total tiene una energía baja que puede ser perturbado y cambiar sus valores. • una energía baja a un bajo valor de radio a óptimo. • Cuánto de luz: “colisiones” a la velocidad de la luz, a ciertas frecuencias.
--	--	--	--	---

		Causalidad de los enlaces químicos	Estabilización de estados de orbitales a energías más bajas después de que el medio tiene una alta probabilidad de perturbar la molécula.	Estabilización de estados de orbitales a energías más bajas después de que el medio tiene una alta probabilidad de perturbar la molécula.
--	--	------------------------------------	---	---

		Leyes de los enlaces químicos	• Cuantificación de la materia y de la energía correspondiente proporcional a la constante de Plank h. • Fundamentación espacio-temporal. • Superposición cuántica • Superposición de estados cuánticos.	• Cuantificación de la materia y de la energía correspondiente proporcional a la constante de Plank h. • Fundamentación espacio-temporal. • Superposición cuántica • Superposición de estados cuánticos.
--	--	-------------------------------	--	--

Para precisar lo evidenciado la tabla 4, de ontologías de los modelos TEV y TOM y resolver las preguntas que se plantearon en la sección anterior, a la luz del realismo pluralista, debe considerarse la naturaleza de los postulados que hicieron ser la mecánica-cuántica un detractor de la hegemonía epistemológica y ontológica de la física clásica a finales del siglo XIX y en el siglo XX y que dieron origen a la química cuántica. Estas preguntas son: ¿Son entidades reales estos objetos fenoménicos o empíricos? ¿Cómo refiere este modelo a la estructura del enlace químico?

De acuerdo con la tesis doctoral de Cárdenas (2004), en los supuestos teóricos de la mecánica cuántica que ponen en duda la idea de una ontología última que plantaba la física clásica, se encuentran las “claves” para interpretar las ontologías de los modelos teóricos presentados en este apartado. Para esto han de considerarse los sucesos cruciales que en clara contradicción con leyes de la física clásica, generaron un profundo debate en la comunidad científica de la física.

Se consideran siguientes cuatro sucesos:

- 1) La discontinuidad de los espectros electromagnéticos.
- 2) La radiación del cuerpo negro.
- 3) El efecto fotoeléctrico.
- 4) La estabilidad del átomo.

Hacia 1860, gracias a los trabajos de Bunsen y Kirchhoff, se estableció el “principio de combinación”. Calentando elementos químicos en el mechero de bunsen y recogiendo los rayos de luz emitidos en el espectroscopio de prisma de Kirchhoff, establecieron la siguiente ley: “las frecuencias de todas las líneas espectrales de un elemento son diferencias de un conjunto de números fijos” (Cárdenas, 2004. Pág. 48). Sin embargo, no había una explicación en términos físicos para entender cómo las líneas espectrales pertenecían a cada elemento, y más aún, que en las placas donde se tomaba el registro de los espectros, aparecían líneas negras como si hubiese una discontinuidad en la absorción. La física clásica en la electrodinámica de Maxell (1831-1879), no parecía explicar este fenómeno de radiación. No fue sino hasta que el mismo Kirchhoff en 1960, planteó un interrogante que fue resuelto por Max Plank. Este fenómeno en el cual el coeficiente de absorción $a\lambda = 1$, en donde la radiación emitida sobre el cuerpo es igual a la radiación absorbida a cualquier longitud de onda. Kirchhoff llamaría a un cuerpo con esta característica como *cuerpo negro*. Relacionando la energía radiante $E\lambda$ por unidad de área, tiempo y unidad de intervalo de λ , este investigador estableció la relación (Garritz, *et al.* (1991):

$$\frac{E\lambda}{a\lambda} = J(T, \lambda) \quad (3)$$

donde la función de J es la potencia emisiva. Esta función para un cuerpo negro, fue tratada de encontrar por varios investigadores como Josef Stefan (1835-1893), Ludwig Boltzman (1844-1906), Wilhem Wien (1864-1928). Wien en 1893, desarrolló una función u λ que tiene un valor máximo para una longitud de onda inversamente

proporcional a la temperatura, como lo hicieron Plank, Rayleigh y Jeans. Sin embargo, en la función de Wien, la densidad de energía no se ajustaba a lo experimental en zonas de bajas frecuencias del espectro electromagnético. La función de Rayleigh-Jeans tampoco concordaba con lo experimental, pues en zonas de altas frecuencias mostraba un aumento ininterrumpido de la densidad de energía. Plank, obtuvo una ecuación en la que combinaba la ecuación de Wien y la de Rayleigh-Jeans, pero esta mostraba una forma de campana al graficar la función u_λ respecto a la longitud de onda λ justo en la zona cercana al ultravioleta. Este problema epistemológico se conocería como la “catástrofe ultravioleta” (Soto, 2005).

Para solucionar esto, Planck tuvo que admitir postulados de la termodinámica estadística de la entropía, $S=k \ln W$. Encontró que la energía de un oscilador es múltiplo de un factor e , que es asimilable en su fórmula semiempírica $e=h\nu$. Donde h es la constante de Planck y es independiente de la frecuencia. De lo cual se puede afirmar, retomando a Garritz, *et al.* (1991), los osciladores solo pueden intercambiar energía en proporciones finitas, no como lo supone la física clásica, que la energía debe ser repartida en cantidades infinitas. Este postulado, da origen a la teoría cuántica, rompiendo con el postulado clásico de la continuidad de los eventos que ocurren en la naturaleza.

Más tarde el efecto fotoeléctrico, aporte de Albert Einstein (1879-1955), sugiere un nuevo fenómeno que no es explicable desde la física clásica. Cuando un rayo de luz ultravioleta, incide en un metal se liberan electrones que a su vez generan rayos de luz. Lo que logra este efecto, no es la intensidad de la luz ultravioleta, sino la frecuencia. Hecho que está en clara contradicción con la física clásica, pues en esta la frecuencia no tienen ninguna relación con la energía ni supone un límite de la repartición de la energía por la superficie expuesta a la radiación (Cárdenas, 2004). Esto dio origen a los “cuantos de luz”, lo cual rompe con los modelos clásicos de descripción de ondas electromagnéticas, introduciendo la posibilidad de que existiese una nueva partícula que G.N. Lewis llamaría fotones. (Cárdenas, 2004. Pág. 55). Esto introduce el comienzo de la dualidad onda-partícula de la luz, que desde la física clásica sería algo extraño e inconmensurable.

También no se haría esperar la dualidad onda-partícula de los electrones, entidades a quienes de Broglie en 1925 les llamaría ondas estacionarias, resolviendo el problema de la estabilidad del átomo que Niels Bohr (1885-1962) en su modelo semicuántico del átomo no había podido solucionar. Esta estabilidad el átomo la atribuía a que los electrones estaban estacionarios, evitando la dualidad onda-partícula y por ende el comportamiento ondulatorio de los electrones. Pues si una carga en movimiento gana energía cinética debe compensar este aumento de energía emitiendo radiación, lo cual haría que el electrón colapsara al núcleo.

Hasta este punto, se puede afirmar que el mundo el cual proponen los postulados

de la teoría cuántica pone en cuestión la ontología del “mundo clásico”. Por lo que en la tabla 4, de ontologías de los modelos químico-cuánticos no aparecen entidades constituyentes de los enlaces químicos individuales, sino entidades que tienen un doble comportamiento.

Para resolver la primera pregunta en cuestión, es necesario hacer hincapié en otras consideraciones que subyacen de estos avistamientos: el principio de la complementariedad y la fundamentación intuitiva temporal.

7.4. EL PRINCIPIO DE LA COMPLEMENTARIEDAD Y LA FUNDAMENTACIÓN INTUITIVA TEMPORAL.

En su tesis doctoral, Cárdenas (2004), examina el estatus epistemológico y ontológico de la teoría cuántica subyacente de las ideas de Bohr plasmadas en su modelo semicuántico y las implicaciones que estas ideas tuvieron en el posterior desarrollo de la teoría cuántica y las nociones de mundo que implica esta “nueva teoría”.

La autora, argumenta que la base de la noción intuitiva de la mecánica cuántica que da la posibilidad de la existencia de objetos o entidades cuánticas, es la fundamentación temporal. Sumado a ello, propone tres condiciones fundamentales para la posibilidad de existencia de las entidades:

- a) *Primera condición:* la determinación de las propiedades físicas del objeto cuántico es de naturaleza fenoménica.
- b) *Segunda condición:* la presencia de elementos objetivos en la teoría cuántica está garantizada por la intuición de tiempo.
- c) *Tercera condición:* el tiempo permite las construcciones espaciales simbólicas, que no tienen por qué ser euclídeas ni conformar un modelo geométrico definido.

La primera condición se para efectos de esta tesis. Sin embargo, el objeto fenoménico cuántico se entiende acá como el resultado del triplete realidad *externa-esquema conceptual-sujeto cognoscente*, siendo también una entidad teórica que goza del mismo estatus ontológico que las entidades directamente observables del mundo macroscópico.

La segunda condición también se admite. Esta condición sobre la fundamentación temporal dice que, de acuerdo con la autora:

“el comportamiento físico de los objetos cuánticos no cumple los requisitos físicos

de la espacialidad (ni de la materia espacializada), así como tampoco sus requisitos filosóficos. La congruencia de ambos tipos ha de conformar las condiciones de posibilidad del objeto y del conocimiento; esto es, sólo pueden coincidir si la espacialidad es euclídea, ya que es esta geometría la que coincide con la percepción humana del espacio y de la forma o figura de los objetos". (Cárdenas, 2004. Pág. 598)

No obstante, la autora afirma que el comportamiento de estas entidades cuánticas "sí se ajusta a los requisitos filosóficos y físicos que fija la intuición temporal".

"Es decir, si bien el espacio, como condición de posibilidad del conocimiento, ha de ser euclídeo y éste no coincide con el espacio físico, como condición de posibilidad de los objetos cuánticos, el tiempo, en tanto sucesiones, frecuencias, series, orden y regularidad física (leyes), sí coincide como condición de posibilidad de los objetos (condición objetiva) a la vez que condición de posibilidad de nuestra forma de conocerlos (condición subjetiva). (Cárdenas, 2004. Pág. 599)

La complementariedad cuántica es una condición de medición que es asociable a la naturaleza de dualidad de las entidades. Esta se trata de que cuando se intenta medir, "observar", obtener evidencia de un objeto fenoménico, siempre se está acompañada de otra u otras entidades que son alteradas al momento de restringir una de ellas para su medición. En efecto, una de estas dos queda indeterminada. Según Cárdenas (2004), para respetar esta noción de intuición temporal dentro de la complementariedad, se deben aceptar tres formas de tiempo *permanencia*, *sucesión* y *simultaneidad*.

La tercera condición dice que, en química cuántica las entidades teóricas como objetos reales no pueden ser correctamente representadas pictóricamente desde la fundamentación espacio-temporal clásica, pues el espacio es discontinuo. En otras palabras, para poder comprender la manera como están dispuestas las entidades en el espacio y como operan, hacemos uso de la percepción y el conocimiento geométrico, es decir nuevamente de la fundamentación en un espacio euclídeo, lo que resulta en una simbolización del espacio cuántico a partir de los objetos fenoménicos.

La concepción clásica de espacio que emplean los modelos de Lewis y Langmuir, que sostiene a la CEEQ y la estructura molecular, aunque es simbólica, trata de una fundamentación espacial-temporal, contraria a las ideas anteriormente plasmadas sobre la manera de establecer la ontología del mundo cuántico. Lo que hasta este punto resulta irreconciliable, pero que no representa problema para la condición de inconmensurabilidad del realismo pluralista.

Desde las condiciones del realismo pluralista, se concluye para la primera pregunta que en la fundamentación temporal aparecen entidades teóricas cuánticas como objetos fenoménicos, que cumplen con las nociones del realismo kantiano acá defendido, en concordancia con la primera condición de este tipo de realismo; la

cuarta condición de democracia teórico-observacional, como ya se había mencionado anteriormente, legitima el estatus ontológico de las entidades teóricas cuánticas u <<observables cuánticos>>.

Resolver la segunda pregunta, sobre la existencia de una estructura del enlace químico, es factible en este punto. Se opta por afirmar que la respuesta esta vez también es de esta manera: el mundo cuántico no habla de CEEQ y estructura molecular geometrizada y euclidiana “obediente” a la fundamentación espacio-temporal. Pero, que no haya una noción geometrizada del espacio cuántico, no quiere decir que desde la noción temporal intuitiva de la física cuántica no haya una manera de que estas entidades duales y con sus características de cuantización estén relacionadas de alguna manera que permita el enlace químico; y tampoco niega la existencia de las entidades estructurales de la química. Aun así, como lo menciona Cárdenaz (2004), “no se tiene un lenguaje cuántico específico en la teoría cuántica, que unifique el comportamiento dual de la energía y la materia, lenguaje propio de la teoría cuántica. Es decir, un lenguaje que no haga uso de supuesto clásicos para referirse a entidades cuánticas”. Caso que es más evidente en los modelos químico-cuánticos expuestos en la tabla 4.

En los modelos TEV y TOM, se hace uso de los lenguajes de la física cuántica y de la química estructural, aludiendo una ontología híbrida. A este hecho se anticipan Lombardi y Martínez (2012), donde concluyen que la química cuántica en sus modelos TEV y TOM, muestran una ontología no propia. Pues el lenguaje de este campo de conocimiento <<interteórico e híbrido>>, se refiere a objetos clásicos con naturaleza de espacio euclidiano con compartimento cuántico. Como se evidencia en la segunda matriz o tabla 4, los modelos TEV y TOM “normalizan” hacia la noción espacio-temporal las funciones de onda de los sistemas de enlace químico. A continuación se discutirá la hipótesis de Lombardi y Martínez (2012). Para ello, la clave está en hacer una rápida pero eficaz descripción de lo que se refiere el formalismo matemático de TEV y TOM que está sustentado en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un estado estacionario y los supuestos de la química estructural que adoptan.

7.5.LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER INDEPENDIENTE DEL TIEMPO COMO BASE MATEMÁTICA EN LOS MODELOS MECÁNICO CUÁNTICOS TEV Y TOM.

Es de comenzar diciendo que la función de onda tiene un significado físico como lo tienen los campos. Pero esta da información que permita describir lo que sucede con una partícula en cuanto a su energía. Ervin Schrödinger (1887-1961), asumió la dualidad onda-partícula adoptando las relaciones de de Broglie $\lambda = h/p$ y Plank $v = E/h$. Definiendo la energía total de la partícula como:

$$E = \frac{p^2}{2m_0} + V \quad (4)$$

Donde V es la energía potencial, $K = \frac{p^2}{2m_0}$, que es la energía cinética clásica. La masa en reposo m_0 y p es el momento lineal de la partícula. Donde E y p son constantes si no varían con el tiempo. En esta ecuación no relativista, la masa es constante y V también.

Para obtener una forma de ecuación independiente del tiempo se estima que el Hamiltoniano H es independiente del tiempo, y la función de onda puede escribirse como la multiplicación de una función del tiempo por una función de la posición de la partícula, así:

$$\Psi(q, t) = \Psi(x)f(t) \quad (5)$$

Sustituyendo ahora en una expresión matemática simplificada de ecuación Schrödinger dependiente del tiempo:

$$i\hbar \frac{\delta (\Psi(x)f(t))}{\delta t} = H \Psi(x)f(t) \quad (6)$$

Ahora, como se considera que la función de onda es independiente del tiempo, la posición y el Hamiltoniano tampoco varían con el tiempo, se pueden sacar $\Psi(x)$ de la derivada respecto al tiempo y $f(t)$ del hamiltoniano. Ahora al dividir ambos lados de la ecuación por $\Psi(x)f(t)$:

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\delta (f(t))}{\delta t} = \frac{1}{\Psi(x)} H \Psi(x) \quad (7)$$

Cada miembro de esta ecuación diferencial puede igualarse a una constante de energía E :

$$i\hbar \frac{\delta (f(t))}{\delta t} = E f(t) \quad (8)$$

$$H \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (9)$$

La ecuación (9) es independiente del tiempo y puede ser usada para describir sistemas químicos que dependen solo de la posición, como en los modelos TEV y TOM.

Al integrar (8), se puede obtener una ecuación que es solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (10), que permite llegar nuevamente a (6).

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta^2 \Psi(x,t)}{\delta x^2} + V \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\delta \Psi(x,t)}{\delta t} \quad (10)$$

Esta solución se obtiene al ordenar e integrar (8), así:

$$\int \frac{df(t)}{f(t)} = \int -\frac{iE}{\hbar} dt \quad (11)$$

$$\ln f(t) = -\frac{iEt}{\hbar} + C \quad (12)$$

$$f(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} * e^C \quad (13)$$

Donde e^C es una constante que puede ser A. (13) será la función de onda $\Psi(x,t)$. Por lo tanto si se deriva (13) una vez respecto al tiempo da:

$$\frac{\delta \Psi(x,t)}{\delta t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (14)$$

Ahora derivando dos veces (13) respecto a la posición, se obtiene:

$$\frac{\delta^2 \Psi(x,t)}{\delta x^2} = \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (15)$$

Ahora, sustituyendo (14) y (15) en (10), arreglando y cancelando por el factor común $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$, se llega a, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V \psi(x) = E \psi(x) \quad (16)$$

En TEV y TOM se toma $E \psi(x)$ de (16) como la función de onda de un electrón que está asociado a un átomo a, y tiene la constante de energía E. El valor de E dependerá entonces de la energía cinética y de la energía potencial. Así, para el

enlace químico, se toma una función de onda total del sistema. Supongamos un enlace de hidrógeno H-H para la molécula de H₂ y que *a* es uno de los electrones del enlace que es atraído por el núcleo B, y *b* es el otro electrón atraído por el núcleo A. Para esto, la función de onda “total” se obtiene de la sumatoria de las funciones de onda de los electrones *a* y *b*.

$$\Psi\psi\Psi^\circ\psi^\circ = \Psi(a) + e\psi(b) \quad (17)$$

Pero, en el “mundo” cuántico, existen un número indeterminado de posibles estados de cada una de estas funciones de onda. Este supuesto se conoce como el principio de la superposición cuántica. TEV emplea este formalismo matemático y simplifica los problemas de resolución de las ecuaciones, eludiendo la superposición cuántica fijando parámetros clásicos de localización, como si los núcleos fuesen estáticos y localizables en una posición fija dentro de un espacio geométrico. Linus Pauling (1931, pág. 1370), propone emplear factores *E* y *e* arbitrariamente en donde la energía es mínima, es decir para Ψ y ψ . También lleva a cabo la adición de funciones de onda como si se tratase de átomos individuales que tienen electrones que son individuales eludiendo el principio de complementariedad. Esto lleva a pensar en que se introducen parámetros y supuestos para el enlace de H₂, por ejemplo en este caso, provenientes de la química estructural. Que son correspondientes a la fundamentación espacio- temporal clásica.

Pauling introduce unos años antes el concepto de resonancia, en el que supone que los electrones de un átomo pueden pertenecer en el enlace químico tanto a un núcleo como al otro, haciendo que hayan dos o más estados superpuestos. Si se tienen en cuenta dentro de la ecuación (24), se puede establecer que el electrón *a* también interacciona con A y el electrón *b* también interacciona con B. Entonces se deben adicionar otros términos descritos en otras funciones de onda, así:

$$\Psi\psi\Psi^\circ\psi^\circ = E\Psi(a) + e\psi(b) + E^\circ\Psi^\circ(a) + e^\circ\psi^\circ(b) \quad (25)$$

Por otro lado, Pauling adjudica geometría a las moléculas relacionando las funciones de onda con coordenadas esféricas polares. Para esto emplea el tratamiento de Max Born (1882-1970), quien llega a afirmar que la densidad de probabilidad de encontrar un electrón en una región es $\Psi \times \Psi$. De esta manera gráfica una región para los electrones de orbitales *s* y *p_x*, como se muestra la figura 10:

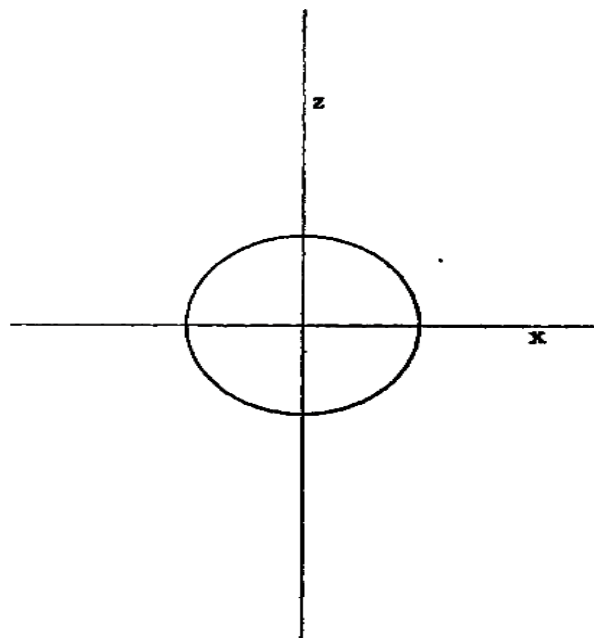


Fig. 1.—Polar graph of 1 in the xz plane, representing an s eigenfunction.

Figura 10. Región de probabilidad de un electrón s Ψ y otro electrón p_x . Tomada de Pauling 1931, pág. 1371.

Esto lo lleva a suponer que para algún enlace M-X, para lo cual M y X pueden ser cualquier especie elemental que forman un enlace simple de pares de electrones. Pauling (1932), propone la función de onda MX, como la siguiente, que tiene un tratamiento un poco diferente al mostrado hasta ahora en este apartado:

$$\Psi_{MX} = \frac{\psi_M(1) \psi_X(2) + \psi_M(2) \psi_X(1)}{\sqrt{2 + 2S^2}}$$

Figura 11. Ecuación función de onda de un enlace simple de par electrónico. Tomada de Pauling 1931, pág. 1372.

Donde S^2 es la densidad o amplitud de probabilidad electrónica de una función de onda de los electrones ψ o de los pares electrónicos enlazados. A partir de esto, supone casos en los cuales, dependiendo de un factor a (de separación nuclear), la función de onda Ψ_{MX} se trata de un enlace químico de pares electrones compartidos cuando es $a = 1$. Y en el otro caso, se trata una función de onda Ψ_{MX} correspondiente a enlaces iónicos, cuando el factor de separación nuclear da tiene valores cercanos a $a = 0$. Pareciese que más allá de una escala relacional de

electronegatividad generada desde medidas indirectas termoquímicas (Ruthenberg & Martínez, 2017), Pauling pudo haber adjudicado al parámetro χ a una medida en cierta medida más directa, y con ello la explicación de la naturaleza de los tipos de enlaces químicos. Este argumento, pone en duda fuertemente el estatus ontológico de la entidad-propiedad llamada electronegatividad. De paso, poniendo en declive la autonomía de la química sobre las explicaciones del enlace químico que se hacen sobre la base de la electronegatividad. Sin embargo, el realismo pluralista, rechazaría la posición de encontrar o descubrir entidades últimas, autoidentificantes que tienen un vínculo directo con alguna denominación del lenguaje, sea físico o químico. Simplemente, el sujeto cognoscente accede a eventos del mundo externo a él por medio de la observación y un esquema conceptual a la realidad; este esquema conceptual pueden ser nociones de la física o la química. Más bien el problema de la electronegatividad es un problema interno de la química de “creer” en una medida indirecta para caracterizar entidades moleculares.

Este modelo TEV, es un modelo teórico híbrido, que combina supuestos teóricos y ontológicos de la mecánica cuántica y la química estructural. Por lo tanto, puede decirse que en esta ontología, se mantiene el supuesto de la concepción estructural del enlace químico, que se legitima desde entidades de las cuales podría decirse que son de una naturaleza híbrida clásica-cuántica, en acuerdo con lo expuesto por Lombardi y Martínez. Pero habría que pensar también en la posibilidad de que dentro del cruce interteórico de la química-cuántica y el aparente <<híbrido de ontologías>> que este campo llevan a suponer, haga falta un lenguaje específico para referirse al mundo que suponen todos los objetos fenoménicos y su dimensión pragmática, teniendo en cuenta el poder explicativo y su funcionalidad como campo de investigación establecido y vigente. Pues el realismo que acá se aborda, no podría excluir esta posibilidad.

Aun así, esta concepción estructural (en Pauling, 1932) sigue correspondiendo a una simbología basada en la fundamentación de intuición espacio-temporal, haciendo caso omiso a la complementariedad, dualidad de entidades e indeterminismo de la mecánica cuántica y finalmente eludiendo el supuesto de Cárdenas (2004), de la posibilidad de existencia de objetos o entidades cuánticas desde la fundamentación temporal. El mismo caso sucede con TOM, pues solo supone otra entidad, como la referenciada en la tabla 4, que es el orbital molecular. En el modelo teórico TOM, se tiene un tratamiento matemático bajo el formalismo de la ecuación (23), pero a diferencia de TEV, el tratamiento matemático asume a los orbitales como orbitales atómicos, de los cuales la sumatoria de sus funciones de onda permite describir el estado de un sistema. Para el caso del orbital molecular, se multiplican los orbitales como si fuese la densidad electrónica de un par enlazante, así:

$$\Psi\psi\Psi^*\psi^* = E \Psi(a)^* e \psi(b) \quad (18)$$

Si se asume el principio de la superposición cuántica, que lleva a estructuras resonantes, la ecuación se ampliaría de esta manera:

$$\Psi\psi\Psi^{\circ}\psi^{\circ} = E \Psi(a) * e \psi(b) + E \Psi^{\circ}(a) * e^{\circ} \psi^{\circ}(b) \quad (19)$$

Si se asumieran los efectos de los electrones de los niveles anteriores en los orbitales moleculares de TOM o en los pares emplazantes de TEV, estas ecuaciones se complicarían aún más en su solución matemática; factores que se refieren a deslocalización de electrones y el resurgimiento de la complementariedad. Lo que supone una “reconciliación” con los supuestos de ontología cuántica de la fundamentación intuitiva temporal, asunto que tiene una implicación explicativa experimental muy fuerte, pues según Michael Weisberg (2007), los métodos químico cuánticos que poseen más términos y consideran mayor deslocalización de los electrones de acuerdo con sus funciones de onda materiales, dan mejores resultados, frente a lo experimental, de energías de enlace y distancias de regiones orbitales.

A partir de este análisis de resultados, en la siguiente sección se discute la viabilidad de legitimar las ontologías mencionadas, enmarcándolas dentro de la denominación de ontologías múltiples. Para esto, se empearan las demás condiciones del realismo pluralista que se asume en esta tesis. Esto permitirá diseñar una mejor defensa de la ontología a la que se refiere el enlace químico, como alternativa a la problemática de la reducción y el supuesto de emergencia de la química al mundo físico-cuántico.

7.6. ANÁLISIS DE LAS ONTOLOGÍAS REFERENTES AL ENLACE QUÍMICO DESDE LOS PRESUPUESTOS TEÓRICOS DEL REALISMO PLURALISTA.

A partir de las respuestas dadas a las preguntas que rigieron el apartado anterior, se puede concluir preliminarmente que las ontologías establecidas desde los modelos clásicos y modelos químico-cuánticos de enlace son ontologías coexistentes entre ellas y refieren cada una, a una concepción estructural del enlace químico. No obstante en la parte final de dicha sección, al analizar los supuestos de la naturaleza de las entidades cuánticas y la capacidad de explicación de estos modelos cuánticos, la concepción estructural del enlace químico se desvanece.

Del importante trabajo de Lombardi y Pérez-Ransanz (2011), base teórica del realismo pluralista de este trabajo, se toman nuevamente los aspectos centrales de este realismo que plantean, y se adapta como intento de defensa de la autonomía del mundo químico. Estos aspectos, que más bien, deberían

entenderse como condiciones que legitiman una ontología en un marco pluralista, rechazando el reduccionismo y el emergentismo ontológico.

7.6.4. Primera condición: Raíces kantinas

Los objetos trascendentales son el sustrato de la realidad externa del sujeto cognoscente, sin embargo son objetos indescriptibles. Esto no implica que haya algún modo de observación y categorización único o unificador. De acuerdo con Van Brakel (2000), no existe ninguna descripción privilegiada de los eventos que son accesibles a nuestra percepción. Esto deroga la idea que pretende el reduccionismo ontológico proveniente de un tipo de realismo metafísico. Pues se habla de que estos objetos trascendentales son noúmenos “cosas-en-sí”, que al interactuar con el sujeto, dotado de un esquema conceptual, concibe y describe las “cosas-para-nosotros”.

Esto significa que desde la interpretación de la ontología de la física cuántica no se puede negar, con la naturaleza de las entidades que describe a nivel microfísico, la existencia de “las poderosas metáforas” de la química, para este caso la concepción estructural del enlace químico y la estructura molecular. Pues las entidades de las ontologías establecidas (las-cosas-para-la-química o las-cosas-para-la-física), en este caso, de la química estructural como de los modelos cuánticos, son objetos fenoménicos que tienen legítimo estatus ontológico según esta primera condición.

7.6.5. Segunda condición: Relatividad conceptual

Ningún esquema conceptual es mejor que otro, y ningún concepto tiene un significado absoluto. Los conceptos evolucionan históricamente y cobran significado según el contexto. Pero la física cuántica brinda “mejores explicaciones” que los modelos estructurales de enlace químico, según Fernández-Rico (1997), que también rechaza el reduccionismo epistemológico:

“Su desarrollo comenzó a finales de los cincuenta con la aparición de los primeros ordenadores para cálculos científicos y ha crecido de tal manera hoy que se puede afirmar que, en gran medida, la realización de estudios teóricos sobre los fenómenos químicos solo depende de la posibilidad de emplear métodos de cálculo existentes. [...] A lo largo de los años 80, estos métodos se comenzaron a recoger en paquetes integrados, preparados para ser usados como “cajas negras” por no especialistas. En ellos, a partir de una sencilla entrada de datos, el usuario puede elegir entre una serie de métodos que permiten resolver problemas conformacionales, espectroscópicos, de reactividad química, etc...”

Como segundo paso, al comienzo de los años 90, se desarrolla el concepto de simulación global. La idea básica consiste en incluir en el mismo paquete de programas, métodos cuánticos, estadísticos, de fluido dinámica, etc., acoplados de manera que los resultados del cálculo al nivel más bajo entren como datos al siguiente nivel. Claramente, este es un paso decisivo hacia la consecución plena de los objetivos planteados en el enunciado de Dirac”.

De esta manera, la funcionalidad de los métodos químico-cuánticos asumió la <<Hegemonía>> que durante los siglos anteriores, pertenecía a la química. Pero se debe tener en cuenta que la química es una ciencia “joven” respecto a la física, pues su primera revolución química y aparición datan de 1770-1790 (Chamizo, 2017). Por su lado, la física y todo lo que la enmarca en lo epistemológico y lo ontológico, aparece desde la antigüedad. De esta manera, esta hipótesis prematura, de que la fundamentación espacio-temporal haya “viciado” los esquemas conceptuales de los químicos, no sería tan improbable.

Entonces, por qué no preguntarse esto: ¿Si el hombre hubiese vivido en un entorno en donde las necesidades de acudir a sustancias, preparados y materiales más frecuentemente que a preguntas y situaciones sobre el tiempo, el firmamento, las fuerzas y las herramientas, no tendría el estudio de las <<sustancias>> (la química) un aparato teórico suficientemente desarrollado y funcional que describa una ontología “primigenia”? (*Se invertirían los papales: el tal vez el reduccionismo y el energetismo serían al revés*).

7.6.6. Tercera condición: Pluralismo ontológico

Como consecuencia de la relatividad conceptual, y de los objetos fenoménicos diferentes de cada ontología, pueden existir ontologías distintas, incluso incompatibles como la mecánica cuántica en un extremo, la química estructural; ontologías igualmente legítimas y objetivas.

7.6.7. Cuarta condición: Democracia teórico observacional.

Intraontológica e interontológica

Cada una de las ontologías que se han reconstruido, sus entidades, presentan el mismo estatus ontológico. Sean las observables directamente como objetos físicos y sustancias o las entidades de los niveles que escapan de nuestra percepción. Así es lógico extender la democracia a los niveles de la física: macrofísico, meso físico y microfísico, y a los niveles de la química, desde Jensen (1998) el nivel molar, molecular y eléctrico. En suma, las entidades que pueblan ontologías al interior de los niveles de cada realidad, gozan de los mismos privilegios de existencia entre estas, y del mismo privilegio entre niveles.

De acá, se desmiente el arbitrario supuesto del emergentismo asimétrico y otros tipos de emergentismo, en donde las entidades de la química, subyacen de una ontología de la física que posee un estatus privilegiado. Es decir que la química

no se limita a “renombrar” o solamente clasificar entidades ya existentes y auto subsistentes, pues la realidad externa está indiferenciada e indeterminada. Por lo tanto, cada esquema conceptual define no solo ciertas propiedades y relaciones, sino el tipo de ítems existentes, es decir las categorías que constituyen la estructura básica de la ontología. Esto evita la denominación de <<Nominalismo>> que introduce Ian Hacking al supuesto de múltiples ontologías. Lombardi y Pérez-Ransanz (2011, Pág. 101).

7.6.8. Quinta condición: La inconmensurabilidad.

Por conveniencia, se toma el significado de inconmensurabilidad como algo que no puede ser mensurado o medido por ser excepcional. Como se puede ver, para este caso se toma como adjetivo de las ontologías que se presentan anteriormente sobre el enlace químico. Ontologías que corresponden al nivel eléctrico y molecular que no son traducibles entre sí, pero que dentro de sí, no pierden el estatus de verdad. Así como lo disponen Lombardi y Ransanz, la verdad en el realismo pluralista se concibe como una verdad por satisfacción, desde la interpretación que hacen de Tarski (1944), una verdad como adecuación. Así, como se evidenció en las ontologías reconstruidas, junto con sus implicaciones, no se puede negar la existencia de entidades de una ontología, solo porque riñe con otra ontología.

Desde Sánchez-Mujica (2009), para Thomas Kuhn “la causa de la inconmensurabilidad se presenta en el cambio de significado que surge entre los términos compartidos en el tránsito interteórico”. En la química-cuántica y en la química estructural se comparten términos que se refieren a entidades, incluso estas comparten términos que son estructurantes en cada marco conceptual, pero que tienen diferente significado. Lombardi y Ransanz (2011, pág. 103) denominan este hecho como un síntoma de “divergencia ontológica”.

Más allá del instrumentalismo y el antirrealismo, las entidades teóricas que surgen en cada ontología son mucho más que “piezas útiles” y “ficciones” que aparecen por el lenguaje, son objetos empíricos o fenoménicos que pueblan una ontología y son funcionales como se evidenció en la reconstrucción histórica planteada en este trabajo. Aquella especulación de Putman en su obra Razón, Verdad e Historia de 1981, de los “cerebros en una cubeta” que el ámbito externo no puede ser referido por el compendio de ficciones teóricas que está instaurado en nuestro lenguaje para referirnos a entidades teóricas, cobra menos fuerza desde este punto de vista realista. El sujeto cognoscente, con sus limitaciones, accede de alguna forma epistémica a lo externo y crea fenómenos los cuales simboliza o representa pictóricamente. De esta forma, aun con sus limitados poderes de observación, (sensorial, científica y tecnológica) no crea ficciones, crea mundos existentes que pueden no tener traducibilidad en otros mundos, pero que tienen un <<sustrato>> de la realidad externa; los sujetos cognoscentes no son “cerebros en una cubeta”.

8. CONCLUSIONES SOBRE EL ESTABLECIMIENTO DE ONTOLOGÍAS DE LOS MODELOS ESTRUCTURALES Y QUÍMICO-CUÁNTICOS RESPECTO A LA CEEQ.

A partir de lo analizado hasta el momento, se puede concluir esta sección anterior sobre el estatuto ontológico de CEEQ.

En primer lugar, se abordan las preguntas que en el planteamiento del problema surgieron. Estas son:

¿Cómo puede sobrevivir la ontología de la concepción estructural del enlace químico a los preceptos teóricos de la mecánica cuántica?, o en términos de Del Re (1998): ¿cómo se puede sostener, ante los preceptos teóricos de la mecánica cuántica, el trabajo de los químicos acerca de la estructura del enlace químico y por consiguiente la concepción de que las moléculas tienen una estructura correspondiente a posiciones nucleares relativas fijas y por lo tanto una forma definida?

Esta pregunta se puede resolver con lo analizado en bajo los supuestos del realismo pluralista. La CEEQ dentro del mundo de la química, junto con sus entidades existe y tienen un estatus ontológico que son innegables por la teoría cuántica. También, en la química existen otras entidades que son inconmensurables y no traducibles en el lenguaje físico-cuántico. Entidades que existen y son reales en el nivel eléctrico estructural de la química (Desde Jensen). Pero es evidente que si algunas entidades tienen carácter material, sus interacciones y causalidad corresponden a fenómenos de naturaleza eléctrica. No sobra decir que se rechaza la idea de hacer referencia a la CEEQ como “bolas” y “palos” en los modelos estructurales, sino más bien se debe entender como un evento dado por las propiedades-entidades que poseen las entidades constituyentes del enlace químico y se distribuyen en un espacio euclídeo, del cual se hacen representaciones simbólicas. Así, la mecánica cuántica rechaza la fundamentación espacio-temporal.

Por lo tanto, los supuestos de pluralidad ontológica, como de inconmensurabilidad rechazan el reduccionismo de las entidades de CEEQ. El supuesto de la dimensión pragmática también defiende el aparato conceptual de la química estructural, de acuerdo con otros autores mencionados anteriormente, las estructuras moleculares junto con los enlaces químicos y su estructura son una representación simbólica de objetos fenoménicos que aparecen en la ontología establecida en este trabajo y que hacen parte del mundo de la química. Si bien estas no representan una imagen-copia del mundo a nivel molecular y eléctrico, son evidencia de lo que ocurre en estos niveles. Así como la física cuántica y la física clásica pueblan sus mundos con entidades que bajo preceptos de la química

carecen de estatus ontología. Esta es la “piedra de toque” de las ontologías múltiples que son coexistente y desde el punto de vista deductivo y determinista, son funcionales.

Otra importante conclusión es la noción espacio-temporal como forma fundamental de observación, permea los esquemas conceptuales (estadio previo de los marcos conceptuales), evidenciándose esta tradición desde los inicios de la química en la explicación de fenómenos que implicaban transitar hacia explicaciones en el submicroscópico. Así que, las ontologías clásicas-estructurales que se reconstruyeron en este trabajo están planteadas desde las nociones de la fundamentación espacio-temporal por sus principales exponentes. La hegemonía del mundo de la física clásica se enfrentó a supuestos que pusieron en cuestión y en crisis la <<ciencia normal>>, por ende ha de poner en duda la existencia de las entidades que se valieron de estas nociones para construir su aparato conceptual.

Este problema, incita a pensar que la química de esa época, <<una ciencia joven>>, se valió del lenguaje espacio temporal para darle “vida” a las entidades fenoménicas que describe. Y esto trae a la mente que la química, por su “primitivo” desarrollo conceptual no desarrolló un lenguaje propio completamente propio, aspecto que también puede permitir los supuestos reduccionistas.

Los modelos químico-cuánticos presentan una ontología híbrida. Como ya lo anticipaban Lombardi y Martínez (2012), TEV y TOM se valen del poder predictivo del formalismo matemático y el marco conceptual cuántico (que implica el uso de entidades cuánticas) para tratar de explicar fenómenos de la química. Por lo tanto es evidente que para dar respuesta a sistemas químicos, hay que volver al marco conceptual estructural de la química clásica.

Por otro lado, el planteamiento de Lombardi y Martínez carecerían de coherencia con los supuestos del realismo pluralista, pues si la química cuántica es funcional y predictiva, tampoco habría que rechazarse por su marco conceptual y sus entidades. Pues más bien el problema reincide en un lenguaje que se “toma prestado” de la química y de la física. Por lo tanto, es de tener en cuenta que si no hay una realidad última y auto significativa y auto subsistente, existen otros mundos que podrían tener un marco conceptual y lenguajes propios. Es este punto debe recalcar en que esta postura no debe confundir con puntos de vista instrumentalistas, antirealistas, o nominalistas, pues se admite una realidad externa que en síntesis con un marco conceptual, da origen a una ontología múltiple.

9. RESULTADOS Y ANÁLISIS RESULTADOS DE INSTRUMENTOS PARA RECOLECCIÓN DE INFORMACIÓN SOBRE LAS CONCEPCIONES QUE TIENEN LOS DOCENTES EN FORMACIÓN AVANZADA ACERCA DE CEEQ.

A continuación se presentan los resultados y el correspondiente análisis de cada una de las preguntas del instrumento 3. Para esto presentan en la secuencia que se propone en el instrumento. Posteriormente el análisis se realiza por grupos, como se mencionó anteriormente: grupo de preguntas 1: de carácter ontológico y grupo de preguntas 2: de carácter epistemológico.

Se mencionan de manera muy concreta las respuestas de los docentes en cada pregunta. (Anexo 4).

1. ¿Cuáles modelos teóricos conoce usted acerca del enlace químico:

Se mencionan los referidos por los docentes:

TEV, TOM, Lewis, Kossel, RPECV, Teoría de Bandas.

Como se evidencia en el anexo 4, la tendencia es que los docentes conocen modelos teóricos estructurales o clásicos y modelos químico-cuánticos comunes. Solo que el Modelo de repulsión de pares de Electrones de Valencia, que aparece alrededor de 1940 gracias trabajos de Nevil Sidgwick y Herbert Powell en 1957 por Ronald Gillespie y Ronald Sydney. Este modelo se usa para correlacionar la distribución electrónica de la capa de valencia con la geometría molecular y usa datos de moléculas deducidos de TEV y TOM.

2. ¿Cuál o cuáles de los modelos anteriores, cree usted que explican mejor el enlace químico? ¿Por qué?

Se evidencian varias tendencias:

- La primera: se inclinan por el modelo RPECV, debido a su “capacidad de explicación” referente a la estabilidad y a lo que ocurre con la entidad energía.
- La segunda: se inclinan por los modelos químico-cuánticos. En especial por TOM.
- La tercera: argumentan que todos los que mencionaron tienen cierta funcionalidad y por lo tanto vigencia.
- La cuarta: argumentan a favor de los modelos clásicos de Lewis y Kossel.

En las respuestas, se encuentra que 2 docentes optan por el modelo RPECV,

aunque su funcionalidad sea básicamente explicativa frente a la geometría molecular. Pero este modelo no permite explicar la naturaleza de los enlaces, es decir la naturaleza de las entidades a las que refiere. Puede resultar que estos docentes opten por este modelo por la facilidad que tiene este para simbolizar la geometría de molecular y la estructura molecular y realizar predicciones en reacciones químicas.

Por otro lado, optan por TOM. 4 docentes argumentan que es el modelo más explicativo por su capacidad explicativa y su sofisticación que proviene de la mecánica cuántica junto con su ontología. No obstante, uno de ellos argumenta que este modelo no explica totalmente la naturaleza del enlace químico. En el tercer caso, se encuentra que 5 docentes reconocen que la funcionalidad de estos modelos es limitada. Solo explican una parte del fenómeno enlace químico. En el último caso, 1 estudiante opta por los modelos clásicos de Lewis y Kossel. Sin embargo, erróneamente atribuye el enlace covalente a Lewis, cuando Langmuir, modelo que de hecho no se menciona por ningún docente encuestado, es el primero que se refiere a la “covalencia” en la publicación de 1932. Años más tarde, en TEV, desde los trabajos de Linus Pauling, Walter Heitler y Fritz London se estableció este tipo de enlace. Como otro aspecto, este docente menciona la necesidad de incluir modelos basados en la ecuación de Schrödinger.

3, 4, 5, 6, 7. Sobre las entidades, las propiedades-entidades, las relaciones, los cambios, la causalidad. Se encontraron las siguientes respuestas, sobre entidades presentes en el enlace químico:

- Entidades:

Electrones, protones, núcleos, orbitales, entidades-propiedades como la electronegatividad y la afinidad electrónica. Nube electrónica. Electrones como discontinuidad de la materia. Partículas elementales provenientes del modelo estándar del átomo

- Propiedades-entidades

Cargas, energías de ionización, masa. Fuerza iónica, electronegatividad, electro positividad, energía de ionización

Las relaciones:: Atracción, repulsión, fuerzas eléctricas fuerzas magnéticas. Relaciones estructurales.

La causalidad y cambios: Inestabilidad de los átomos, electrones desapareados, los “átomos” buscan estados de baja energía. Cambios del entorno.

Por lo general, los encuestados reconocen las entidades a los que refieren los modelos clásicos. Algunos de ellos, que optan por el modelo mecánico-cuántico TOM, mencionan estas entidades de la manera clásica. Ninguno aclara que son entidades, que en la ontología de la teoría cuántica su naturaleza es dual y no euclídeana. En otros casos, atribuyen carácter de entidades individuales a los modelos cuánticos que mencionan en acuerdo con las respuestas anteriores (Anexo 4). Atribuyen masa, como extensión, sin embargo no clarifican si es de naturaleza discontinua o no, y entonces a qué modelo(s) corresponde. En el caso específico el participante 12, menciona que “una de las propiedades del electrón es ser la unidad de masa discontinua de la materia”. Sin embargo, esta es una noción de naturaleza de la materia proveniente de la teoría cuántica. El participante 11 afirma que estas entidades no tienen propiedades.

Dentro de las respuestas sobre relaciones, por lo general se indica que las entidades se relacionan debido a las fuerzas que se ejercen entre las entidades que mencionan y cambios en la energía. Lo cual resulta cierto dentro de los modelos estructurales y los modelos químico-cuánticos. Pero no se hace la distinción de la existencia de la energía como discontinua en los modelos cuánticos.

Frente a la causalidad de los enlaces químicos, la tendencia nuevamente es priorizar los modelos químico-cuánticos, como si se asumiera que son la mejor forma de representación y explicación de los enlaces químicos. Parece hasta este punto, que se considera que TOM es la una teoría que “asemeja más a la realidad” y en concordancia con las respuestas anteriormente dadas, se asumen compromisos metafísicos con una realidad última. Como si la realidad externa fuese autoidentificante. Los participantes 11 y 12, presentan diferencias ante esta afirmación, pues se evidencia en cada una de sus respuestas que consideran a estas formas de explicación del enlace químico como modelos que no refieren a una ontología última.

10 y 11. Sobre las propiedades periódicas de las entidades elementales y las leyes que rigen el enlace químico.

Por lo general se afirma que todas estas propiedades de las entidades elementales son definitorias en el enlace químico excepto un participante. Por lo general mencionan propiedades como, afinidad electrónica, radios atómicos, electronegatividad, etc. Pues afirma que ninguna de estas propiedades lo es.

Sobre las leyes se hace referencia, por lo general, a leyes y supuestos como “ley del octeto”, de la periodicidad química, la dualidad onda-corpúsculo.

En esta ocasión, se presentan respuestas que dejan ver la tendencia de que se conocen leyes que son específicas de los modelos. No obstante, En algunos casos, se tiende a atribuir leyes de algunos modelos a modelos diferentes, eludiendo la naturaleza de las entidades que describen los modelos que mencionan.

Hasta este punto se evidencia que, por lo general, hay concepciones “híbridas” de los modelos teóricos del enlace químico, así como se puede evidenciar en las anteriores respuestas.

13. ¿Existen las entidades que usted describe?, teniendo en cuenta que la descripción de muchas de estas es teórica.

Se presentan tres tendencias generales:

1. Existen porque hay evidencias del comportamiento real de las entidades.
2. Existen porque son descritas un marco conceptual y pertenecen a una ontología.
3. Existen pues hay evidencias teóricas y experimentales de estas.
4. Existen como piezas útiles hasta que dejan de ser funcionales y se reemplazan.
5. No existen.

En la primera tendencia, algunos participantes afirman que hay un tipo de realismo metafísico y refiere a una ontología última. En la segunda tendencia se encuentra que los participantes afirman que las entidades teóricas existen y son definidas por un marco conceptual; tienen el mismo estatus de entidades observables. Similar es el caso de los que afirman que existen pues hay evidencias en el nivel macroscópico o molar, asociando esto a su dimensión pragmática.

Por otro lado, de la cuarta tendencia se puede afirmar que las entidades teóricas que pueblan las ontologías a las que refieren los encuestados, son instrumentos útiles, y por decirlo de algún modo son ficciones, que pueden ser abandonadas cuando aparece un modelo más funcional y que describe una ontología diferente. Por último, el participante 12 afirma que no existe. Se ha evidenciado en sus respuestas que hay una fuerte tendencia a rechazar el realismo de las entidades de los modelos que a los que ha hecho mención.

12. ¿Qué importancia ha tenido la descripción de la naturaleza de los enlaces químicos que usted ha descrito hasta el momento, en la idea de la estructura molecular y su funcionalidad en la química?

Se encuentra que la tendencia general es:

La estructura molecular, como resultado del arreglo, la asociación e interacción de las entidades que constituyen los enlaces químicos, permite el entendimiento del

Nuevamente se evidencia que hay una tendencia a justificar la existencia de entidades constituyentes del enlace químico, debido a su “presencia” en la entidad estructura molecular. Se observa que estas justificaciones subyacen de la forma

como estas entidades son funcionales en la dimensión pragmática del enlace químico. Sin embargo, en algunos casos no hay claridad sobre modelos teóricos que sustentan la concepción estructural del enlace químico y llevan a pensar, como se afirmó antes, que hay concepciones híbridas de las ontologías referidas.

De la segunda sección de preguntas, las preguntas de corte epistemológico o grupo 2, se hace necesario mencionar las preguntas 15 y 16, que tienen que ver con la manera como los docentes en formación avanzada caracterizan lo que ellos dejan ver en sus respuestas anteriores, como “funcionalidad de la estructura molecular y la estructura de los enlaces químicos”. Esta caracterización se refiere a la interpretación física y la interpretación química de la estructura molecular y CEEQ. Es curioso encontrar que hay tendencia fisicalistas y reduccionistas. Hay afirmaciones al respecto como: “los nuevos métodos de investigación permiten precisar los atributos de la entidad estructura molecular”. Algunos defienden la autonomía de esta entidad, que apoyándose en el análisis de sus anteriores respuestas, legitiman su existencia y su irreductibilidad a la física.

10. CONCLUSIONES ACERCA DE LAS CONCEPCIONES DE LOS PROFESORES PARTICIPANTES EN FORMACIÓN AVANZADA

Para concluir este apartado, y dar respuesta a la segunda pregunta mencionada en el planteamiento del problema, se debe acudir nuevamente a la primera pregunta de este, pero ahora refiriéndose a la concepción de los profesores participantes.

Es importante ahora mencionar la siguiente pregunta sobre las concepciones que tienen los docentes sobre CEEQ: ¿Existe para los docentes participantes, la concepción estructural del enlace químico? A esta primera pregunta, la respuesta es que sí. Pues la tendencia es la de legitimar el estatus del enlace químico y la concepción estructural, así en la mayoría de los casos se conciben desde modelos híbridos como entidad teórica. Hay una predominancia al desconocimiento de la naturaleza del enlace químico que propone cada modelo, y esto reincide directamente en la ontología que para ellos existe. Se observa que se emplean muchos términos del lenguaje de todos los modelos para referir a entidades que para ellos son comunes en todos los modelos.

En lo que respecta a la característica de fundamentación intuitiva de las ontologías del enlace químico, las concepciones teóricas híbridas del profesor encuestado, muestran una noción también híbrida que está entre la fundamentación espacio-temporal clásica y la fundamentación temporal cuántica (Aún sin ser consiente de). Dichas concepciones híbridas, pobladas del volumen de términos evidenciado, pueden incurrir en errores conceptuales que seguramente se ven reflejados en sus prácticas discursivas sobre la química en el aula. Creando así, un léxico químico sobre el enlace químico, con matices fisicalistas y abstractos que conllevan a concepciones un reducidas epistemológica y ontológicamente.

Dentro de los encuestados, participaron dos docentes del programa de Maestría de Docencia de la química de la Universidad Pedagógica Nacional, de quienes se analiza que hay una concepción no híbrida, lejana de la tendencia mencionada. Es un hecho que hay una formación filosófica (epistemológica y ontológica) y teórica en química que permite conocer que sus concepciones hay cierto nivel de complejización y coherencia, abandonando los tipos de realismo metafísico que exhibieron algunos de los docentes encuestados. De aquí, que otro objetivo implícito de este trabajo es resaltar la importancia de la educación química desde una perspectiva filosófica.

11. RECOMENDACIONES

- En futuras investigaciones sobre este tema, debe abordarse la *dimensión pragmática* como una de las condiciones del Realismo Pluralista que es bastante amplia. Pero implica un estudio histórico-epistemológico muy detallado al realizar un esbozo de la dimensión pragmática del enlace químico y la CEEQ, mostrando que el conocimiento genuino de la química que es autónomo e irreductible.
- El estudio de los fundamentos teóricos químico-cuánticos y los formalismos matemáticos cuánticos son fundamentales para comprender a lo que se refieren los modelos teóricos sobre el enlace químico tanto en lo ontológico como en lo epistemológico. Y para acceder a de ello, es primordial acudir al análisis histórico que muestre su desarrollo, en la época y las circunstancias específicas, permitiendo detallar aspectos epistemológicos y ontológicos centrales. Es este caso el paradigma clásico en crisis frente al paradigma de la teoría cuántica: el problema del cuerpo negro y la catástrofe ultravioleta, la naturaleza de la luz, los espectros de absorción.
- Como principal recomendación, la intención de trabajos posteriores a este debe girar alrededor de analizar los sentidos y los significados construidos a partir de reflexiones filosóficas-ontológicas sobre el enlace químico, por medio de una intervención en el aula. Evaluando la manera como se transforma el discurso de los docentes. Este fue solo un estudio diagnostico que es fundamental en el para determinar la necesidad de incluir la filosofía de la química en los distintos niveles de formación en química.

12. BIBLIOGRAFÍA

Aduriz-Bravo, A., García, M., Izquierdo, M., & Quintanilla, M. (2016). Historia, Filosofía y Didáctica de las Ciencias: aportes para la formación del profesorado de ciencias. Bogotá D.C: UD Editorial.

Aponte, A. (2014). El estatuto epistemológico del concepto de enlace químico en la formación avanzada de profesores. (Tesis de Maestría). Universidad pedagógica Nacional. Bogotá D.C.

Barradas, F. (2016). Los orbitales en la educación química: un análisis mediante su representación gráfica. (Tesis Doctoral). Universidad Complutense De Madrid. Madrid.

Camarero, E. (2008). La ciencia y la enseñanza de las ciencias en España: Un ejercicio de memoria histórica. *Enseñanza De Las Ciencias*, 26(1), 125–140.

Cárdenas, Y. (2004). Espistemología, Ontología Y Complementariedad En Niels Bohr. Memoria para optar al grado de doctor. Universidad Complutense de Madrid.

Contreras, A., Otero-de-la-Roza, A., & Recio, J. (2014). El enlace químico y su supervivencia en la Química Cuántica. *An. Quím*, 110 (2), 113-120

Cordoba, M. & Martinez, J. (2014). Los orbitales cuánticos y la autonomía del mundo químico. *THEORIA* (80), 261-279.

Couper, A. (1858). On a New Chemical Theory. *Philosophical Magazine*, 16, (21), 104-116.

Crotty, M. (1998). The Foundations Of Social Research: Meaning And Perspective In The Research Process. London: Sage Publications.

Cruz, D., Chamizo, J. & Garritz, A. (1986). Estructura atómica. Un enfoque químico. México D.F: Addison Wesley Iberoamericana.

Cuello, G. (2007). "La sana crítica, sistemas de valoración de la prueba judicial" En: Colombia 2007. Bogotá: Javegraf

Del Re, G. (1998). Ontological Status of Molecular Structure. *HYLE – An International Journal for the Philosophy of Chemistry*, (4), 81-103.

Erduran, S y Mugaloglu, E (2013). Philosophy of chemistry in chemical education: recent trends and future directions. Handbook of research on history, philosophy and sociology of science springer. University of Bristol.

Erduran, S., Adúriz-Bravo, A. y Namman, R. (2007). Developing epistemologically empowered teachers: examining the role of philosophy of chemistry in teacher education. *Sci & Educ*, (16), 975-989.

Fernández, J. (2010). La enseñanza de las teorías del enlace químico como

posibilitadores para el desarrollo del pensamiento crítico (Tesis Maestría). Bogotá: Universidad Pedagógica Nacional.

Garay, F. (2010). Historia de la formación de profesores en Colombia y la inclusión de la historia de las ciencias. *MaDoQuim: Memorias de la Maestría en Docencia de la Química*, 1(1), 19-24.

Gagliardi, R. y Giordan, A. (1986). La historia de las ciencias: Una herramienta para la enseñanza, *Enseñanza de las Ciencias*, 4(3), 253-258.

Gallego, A. y Gallego, R. (2007). Historia, Epistemología Y Didáctica De Las Ciencias: Unas Relaciones Necesarias. *Ciência & Educação*, 13(1), 85-98.

Gallego, R., Pérez, R. y Franco, R. (2016). Lecturas en didáctica de la Química. Universidad Pedagógica Nacional. Bogotá, Colombia.

Garritz A, Chamizo, J. Cruz-Garritz, D. (1991). Estructura atómica, un enfoque químico. México D.F, México. Addison-Wesley Iberoamericana

Goddard, R & Muller, R. (2002). Valence Bond Theory. *Encyclopedia of Physical Science and Theory*, 17(3), 410-419.

Hendry, R. (1999). "Molecular models and the custion of physicalism", *HYLE. International Journal of Phylosophy of Chemistry*. (5), 143-160.

Jensen (1998). Does Chemistry Have a Logical Structure?. *Journal of Chemical Education*. 75 (6). 669-687

Kim, J. (2014). El fisicalismo no reduccionista y su problema con la causalidad mental. *Ideas y Valores*, 63(155). 235

Kossel, W. (1916). Molecule Formation as a Question of Atomic Structure. *Annalen der Physik*, (49), 229-362

Kuhn, T. (1972). La estructura de las revoluciones científicas. México: Fondo de Cultura Económica.

Langmuir, I. (1919). The structure of atoms and the octet theory of valence. *Journal of the American Chemical Society*, 7(7), 252-259.

Lewis, G.N. (1916). The Atom and the Molecule. *Journal of the American Chemical Society*, (38), 762-786

Lakatos, I. (1970). Historia De La Ciencia Y Sus Reconstrucciones Racionales, Holanda: Tecnos, S. A.

Llored, J. (2014). Whole-Parts Strategies in Quantum Chemistry: Some Philosophical and mereological lessons. *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, 20, 141-163.

Lombardi, O. y Pérez-Ranzans, A. (2011). Los Múltiples Mundos de la Ciencia. Un Realismo Pluralista y su Aplicación a la Filosofía de la Física. México: UNAM-Siglo XXI, en prensa.

- Lombardi, O. & Labarca, M. (2010). Acerca del status ontológico de las entidades químicas: el caso de los orbitales atómicos. *Principia*, 14(3), 309–333.
- Lombardi, O. y Labarca, M. (2006). The Ontological Autonomy of the Chemical World: A Response to Needham. *Foundations of Chemistry* 8, 81–92.
- Lombardi, O. y Labarca, M. (2005). The Ontological Autonomy of the Chemical World. *Foundations of Chemistry*, (7), 125–48.
- Lombardi, O. y Labarca, M. (2004). En Defensa de la Autonomía Ontológica del Mundo Químico. *Diálogos*, 84: 51–70.
- Lombardi, O. & Martínez, J. (2012). Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué refiere la química cuántica? *Comscientiæ zudia*, São Paulo, v. 10(4), 649-70.
- Lynn, M. (2008). The physico-chemical nature of the chemical bond: valence bonding and the path of physico-chemical emergence (Tesis Doctoral). Toronto: University of Toronto.
- Matus, L. (2009). Progresiones de aprendizaje en el área del enlace químico. Análisis entre capacidades de los estudiantes y las representaciones usadas en los libros de texto (Tesis Doctoral). Mendoza: Universidad de Granada.
- Pauling, L. (1931). The nature of the chemical bond application of results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules. *Journal of the American Chemical Society*, (53), 1367-1400.
- Scerri, E. & McIntyre, (1997). The Case for the Philosophy of Chemistry. *Synthese*, (111) 213–232.
- Scerri, E. (2000). Have Orbitals Really Been Observed?. *Journal of Chemical Education* 77, 1492–94.
- Scerri, E. (2007). The Periodic Table – Its Story and Its Significance. New York: Oxford University Press.
- Schummer, J. (1998). The Chemical Core of Chemistry I: A Conceptual Approach. *HYLE--International Journal for Philosophy of Chemistry*, 4(2), 129-162
- Talanquer, V. (2011). Educación química: escuchando la voz de la historia y la filosofía. Universidad Pedagógica Nacional
- Van Brakel, J. (1997). "Chemistry as the science of the transformation of sustancias". *Synthese*. (111), 1717-1728.
- Van't Hoff, J. (1874). A suggestion looking to the extension into space of the structural formulas at present used in chemistry. And a note upon the relation between the optical activity and the chemical constitution of organic compounds. *Archives Neerlandaises des Sciences Exactes et Naturelles* (9), 445-454.

Vemullapalli, G. K. y Byerly, H. (1999). "Remnants of reductionism". *Foundations of Chemistry*, (12), 17-41.

Vesterinen, V. Aksela, M. y Sundberg, M (2009). Nature of Chemistry in the National Frame Curricula for Upper Secondary Education in Finland, Norway and Sweden. *Nordina*, 5(2), 200-212.

Vesterinen, V. (2012). Nature of science for chemistry education design of chemistry teacher education course. Academic dissertation to be presented, with the permission of the faculty of science of the University of Helsinki. <https://tuhat.helsinki.fi/portal/files/24263737/natureof.pdf>.

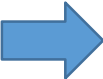
Villaveces, J (2000). Química y epistemología, una relación esquivia. *Revista Colombiana de Filosofía de las ciencias*, (1), 9-26

Weisberg, M. (2007). Challenges to the Structural Conception of Chemical Bonding. *Philosophy of Science*, 75 (5), 932-946.

Wiser, M. (1988). The differentiation of heat and temperature: History of science and noviceexpert shift, en S. Strauss. Ed. Ontogeny, phylogeny and historical development

Zeidler, P. (2000). The epistemological status of theoretical models of molecular structure. *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, (6), 17-3

Anexo 1. Categorías generales o de rastreo de entidades constituyentes de ontologías.

			Ontologías soportadas en la química estructural		Ontologías soportadas en la química cuántica	
		Categorías de rastreo	G. N Lewis	I. Lagmuir	TEV	TOM
Objetos trascendentales ↕ "X"		Entidades/individuos constituyentes de los enlaces químicos				
		Propiedades de las entidades del enlace químico				
		Relaciones entre entidades del enlace químico				
		Causalidad de los enlaces químicos				
		Cambios en la naturaleza del enlace químico				
		Leyes y axiomas de los enlaces químicos				
Marco esquema conceptual						

Anexo 2. Instrumento para recolección de información sobre las concepciones de los docentes acerca de CEEQ.

1. ¿Cuáles modelos teóricos conoce usted acerca del enlace químico? *
2. ¿Cuál o cuáles de los modelos anteriores, cree ud que explican mejor el enlace químico? ¿Por qué?
3. ¿Qué entidades u objetos conforman los enlaces químicos? *
4. Describa brevemente las propiedades que tienen las entidades mencionadas en la respuesta anterior. *
5. ¿Qué relaciones hay entre estas entidades? *
6. A partir de lo mencionado anteriormente, describa brevemente qué causa y cómo se causan los enlaces químicos. *
7. Diga brevemente por qué y cómo cambian los enlaces químicos. *
8. ¿Qué evidencias (medidas, cálculos, registros) se tienen de las entidades que mencionó anteriormente? *
9. Mencione brevemente los trabajos científicos que permitieron obtener estas evidencias. *
10. ¿Qué propiedades periódicas como electronegatividad, valencia, afinidad electrónica, potenciales, radios, etc., son definitorias en la formación de los enlaces químicos? *
11. ¿Qué leyes rigen los fenómenos del enlace químico? *
12. ¿Qué importancia ha tenido la descripción de la naturaleza de los enlaces químicos que usted ha descrito hasta el momento, en la idea de la estructura molecular y su funcionalidad en la química? *
13. ¿Existen las entidades que usted describe?, teniendo en cuenta que la descripción de muchas de estas es teórica. *
14. ¿Por qué los modelos teóricos provenientes de la mecánica cuántica, como lo son TEV (Teoría del Enlace de Valencia) y TOM (Teoría del Orbital Molecular) alcanzan resultados teóricos de energía de enlace más aproximados a los resultados experimentales, a comparación de los modelos clásicos de enlace químico (Lewis y Langmuir)? *

15. Opine brevemente sobre las siguientes imágenes: *
16. Realice un breve argumento sobre lo siguiente: El formalismo matemático de la ecuación de Schrödinger y los principios mecánicos-no clásicos niegan la existencia de algunas de las entidades que aparecen en los modelos clásicos de enlace químico. Estas ecuaciones, hechas para describir moléculas son más precisas y funcionales al abandonar los supuestos clásicos de la naturaleza de entidades. Sin embargo, muchas de estas hoy en día no se pueden resolver por su complejidad. Para solucionarlas, los químicos teóricos introducen supuestos clásicos de existencia de las entidades como en TEV y TOM. Según Pauling (1931), esta gráfica es el resultado de las soluciones de las eigenfuntions o funciones de onda cuánticas combinadas de los orbitales enlazados en una posible molécula que tiene contiene carbono (CX_4).

Anexo 3. Resultados del instrumento para la recolección de información sobre las concepciones de los docentes a cerca de CEEQ.

Para su revisión tener en cuenta que son 12 profesores encuestados.

¿Cuáles modelos teóricos conoce usted acerca del enlace químico?

- 1) Modelo de repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia, RPECV, teoría de orbitales moléculares,
- 2) Enlace iónico, covalente puro y polar, enlace metálico
- 3) TEV, TOM, Lewis, RPECV
- 4) Lewis, Repulsión de pares electrónicos libres en la capa de valencia (RPECV), Teoría del enlace de valencia (TEV) y Teoría del orbital molecular (TOM)
- 5) Lewis y Kossel
- 6) Teoría del enlace de valencia, orbital molecular y cuántico.
- 7) Modelo VSEPR, Teoría del enlace de valencia, Teoría del orbital molecular.
- 8) Teoría del enlace de valencia y teoría de los orbitales moleculares
- 9) Vander Walls; Broglie; Lewis; Pauling, Teoría del orbital molecular
- 10) Teoría del orbital molecular, teoría de enlace de valencia, modelo de Lewis
- 11) Tom TEV bandas
- 12) Teoría de valencia, orbital molecular.

¿Cuál o cuáles de los modelos anteriores, cree ud que explican mejor el enlace químico?

¿Por qué?

- 1) La teoría RPECV ya que manifiesta que los electrones de la capa de valencia son los que interactúan entre sí para la formación del enlace teniendo en cuenta el suministro o consumo de energía del sistema.
- 2) Los tres son diferentes por tal motivo son válidos para tener en cuenta.
- 3) RPECV, debido a que aproxima de manera concreta a la geometría molecular
- 4) TOM: Porque se fundamenta en los 4 números cuánticos, aproximándose a las dinámicas de las partículas subatómicas.
- 5) Las dos teorías son acertadas desde sus planteamientos, Lewis con los enlaces covalentes, en donde se comparten electrones y Kossel con los enlaces iónicos, en donde se ceden o ganan electrones. También es necesario incluir el modelo atómico de Schrödinger.
- 6) Orbital molecular
- 7) Considero que ninguno de los tres modelos teóricos anteriores explica de manera completa la concepción de enlace químico. Debido a que en la actualidad existen varias evidencias científicas las cuales aportan de manera significativa a una construcción consolidada del enlace químico. Sin embargo el más próximo y del cual se puede partir para lograr un acercamiento a aprendizaje de dicho concepto, considero que la teoría del orbital molecular es una buena aproximación.
- 8) Considero que cada teoría proporciona consideraciones teóricas que justifican el comportamiento atómico. Pero si debo inclinarme por alguna de los anteriores sería por la teoría del enlace de valencia, por un conocimiento más cercano a esta teoría
- 9) Lewis- Vander Walls; ya que permiten explicar el fenómeno a nivel atómico-molecular y eléctrico

- 10) Teoría del orbital molecular, quizá por abarcar una lógica coherente al intentar explicar fenómenos como la deslocalización de electrones, la polaridad en una molécula por concentración de densidades electrónicas, multidireccionalidad como es el caso del enlace iónico, entre otros.
- 11) Ninguno, todos explican apenas una parte del fenómeno.
- 12) No son excluyentes, más bien complementarias.

¿Qué entidades u objetos conforman los enlaces químicos?

- 1) Electrones, átomos, iones, moléculas
- 2) Los átomos involucrados, de ellos su estructura y de su estructura los electrones, los orbitales desapareados, para que se dé el enlace las fuerzas y por tanto las partículas atómicas.
- 3) Los átomos
TOM considera los electrones como parte de un todo, y estos son los principales actores en la formación de orbitales que permiten la unión entre átomos. Aunque la teoría hace énfasis en los orbitales moleculares y los electrones (entidades u objetos), es necesario tener presente que los orbitales moleculares se forman por la preexistencia de orbitales atómicos. Es decir que las interacciones entre núcleos y electrones de un mismo átomo, también tiene incidencia en la formación de orbitales moleculares, en términos energéticos.
- 4) Un enlace se establece desde el movimiento de electrones, en ese sentido ellos serían una identidad, específicamente los electrones de valencia, claramente sería necesario incluir las fuerzas y cargas presentes; electronegatividad, energía de ionización y afinidad electrónica.
- 5) Electrones, protones y neutrones (núcleos atómicos)
- 6) Considero que la entidad más relevante de un enlace químico independientemente de la naturaleza del elemento o elementos que lo estén conformando, es la energía.
- 7) Las interacciones entre los electrones y sus orbitales
- 8) Átomos, electrones, orbitales,
- 9) Electrones.
- 10) Orbitales, electrones, o cual tampoco es cierto, porque estas entidades son conformacionales del un sistema químico. Se debe revisar el nivel eléctrico.
- 11) Los átomos de los elementos enlazados y la interacción entre sus electrones.

Describe brevemente las propiedades que tienen las entidades mencionadas en la respuesta anterior.

- 1) Partículas que poseen o no una carga, momento angular, comportamiento dual (onda-partícula).
- 2) Los átomos son los que van a estar involucrados en un enlace por tal motivo deben tener unas propiedades para poder interactuar con otro que tienen propiedades aptas para ésta interacción como electrones de valencia, electronegatividad, afinidad electrónica, potencial de ionización, orbitales y en ellos electrones desapareados, las partículas del átomo como protones en el núcleo y otras partículas, los electrones que son de los que se habla en los textos pero que las partículas de las que no se habla deben tener su aporte en la formación y rompimiento de enlaces.
- 3) Los átomos a través de los electrones de valencia establecen vínculos energéticos que repercuten en la naturaleza y características de los materiales

- 4) Se describen como funciones de onda, sus características responden a unas energías, se describen a partir de los números cuánticos.
- 5) Electrón, partícula elemental de un átomo con carga negativa, encargada de las interacciones de este con otros átomos.
- 6) Electrones de valencia, electrones externos de un átomo.
- 7) Electronegatividad, probabilidad de atracción entre átomos.
- 8) Afinidad electrónica, energía liberada cuando un átomo acepta un electrón.
- 9) Energía de ionización, energía necesaria para liberar un electrón.
- 10) Carga (energías) y masa.
- 11) Propiedades de transferencia, almacenamiento, transporte y transformación.
- 12) de los electrones su particular comportamiento eléctrico e incidencia en la formación de sustancia.
- 13) fuerza iónica, electronegatividad, electropositividad, energía de ionización
- 14) Los electrones otorgan cargas parciales a una molécula debido a la distribución de la nube electrónica dentro de la misma.
- 15) no tienen propiedades.
- 16) Los átomos, como unidad de discontinuidad de la materia con una estructura interna de naturaleza compleja. Los electrones, concebidos desde la teoría dual onda-partícula cuya interacción en la formación de enlaces es también compleja.

¿Qué relaciones hay entre estas entidades?

- 1) Relaciones electromagnéticas, atracciones electrostáticas, flujo de energía entre las partículas.
 - 2) En la interacción de dos átomos debe haber una afinidad respecto a las propiedades para que se genere un enlace respecto a fuerzas de atracción o repulsión entre partículas en forma de energía. los espacios u orbitales han de estar desapareados para dar lugar al solapamiento de éstos y acomodación de pares de electrones mediante fuerzas de atracción.
 - 3) Atracciones y repulsiones.
 - 4) Los orbitales moleculares describen la disposición de los electrones en una molécula. Sin electrones no existen orbitales atómicos ni moleculares.
- Electronegatividad, afinidad electrónica y energía de ionización, son las encargadas de determinar si un átomo puede interaccionar con otro, en el sentido de ceder o de ganar electrones (electrones de valencia) o simplemente atraer átomos vecinos. Aspecto clave para definir una posible reacción o formación de un compuesto.
- 5) las atracciones entre entidades se establecen en los niveles de energía de cada entidad atómica o molecular con el núcleo de otra u otras partículas, estableciendo propiedades a fin que generan el enlace químico.
 - 6) Relaciones de interacción energética.
 - 7) los electrones al interaccionar lo hacen en condiciones especiales, según la teoría de enlace de valencia se consideran electrones desapareados
 - 8) son causas de las interacciones atómicas en la formación de moléculas
 - 9) Su relación está desde la interacción entre especies químicas afines
 - 10) estructurales.
 - 11) Al establecer relación entre átomos electrones para la formación de enlaces, inevitablemente se han de involucrar los otros constituyentes de los átomos tales como los protones, los neutrones, y la innumerables partículas elementales que lo conforman.

A partir de lo mencionado anteriormente, describa brevemente qué causa y cómo se causan los enlaces químicos.

- 1) Se manifiesta como la unión de electrones de 2 núcleos iguales o diferentes los cuales presentan un número cuántico determinado (spin), que minimiza las posibles repulsiones que puedan haber entre ambos.
- 2) interacción entre átomos con propiedades que existen en cada uno de ellos y que son compatibles en la formación de los mismos, deben tener unas fuerzas de atracción relacionada con las cargas del átomo protones y electrones pero quienes se hacen evidentes en los modelos son los espacios u orbitales del último nivel de energía en los que nos hacen ver espacios con 1 electrón desapareado en donde encuentra cabida un electrón desapareado de otro átomo para generar un solapamiento de orbitales y que se ubiquen los 2 electrones en ese espacio o nube que se forma. sin embargo todas las partículas tanto electrones protones y otras partículas tienen que ver con los enlaces y la estabilidad de una molécula.
- 3) Los enlaces químicos se derivan de las inestabilidades energéticas de las entidades, las cuales se pueden superar entre la misma entidad o entidades existentes en el medio.
- 4) Los orbitales atómicos de átomos que sean afines forman un orbital molecular. En este orbital los electrones de cada átomo se organizan de forma tal que "buscan" la menor energía potencial en toda la molécula. La densidad de carga se desplaza al átomo más electronegativo.
- 5) Los enlaces químicos se logran si los elementos que lo van a formar, logran tener compatibilidad y energía necesaria para mover sus electrones.
- 6) los enlaces químicos son causados por cambios en los potenciales energéticos, y afinidad entre las entidades atómicas y/o moleculares.
- 7) Un enlace químico se causa a partir de la interacción energética de las fuerzas interatómicas de subpartículas de los átomos de diferente o del mismo tipo que se encuentren participando en la dicha interacción. Es decir, cuando una onda de tipo electromagnética incide sobre la partícula externa del átomo, esto hará que dicha partícula se convierta en un tipo de antena que radia con la misma frecuencia que oscila.
- 8) los enlaces químicos causan la modificación de las propiedades de los átomos participantes, considerando la participación de entidades (spin) en el arreglo atómico.
- 9) los enlaces se forman como una consecuencia de la interacción de las fuerzas buscando un equilibrio electromagnético entre la electronegatividad y la electropositividad.
- 10) Los enlaces químicos se producen por interacción entre las nubes electrónicas de átomos o moléculas.
- 11) no son causales, como se enseñan con electronegatividad.
- 12) Desde la teoría clásica, la transferencia o compartición de electrones; desde la teoría del OM, la organización cuántica de electrones en orbitales enlazantes y antienlazantes.

Diga brevemente por qué y cómo cambian los enlaces químicos.

- 1) Diferencias entre electronegatividades y en números cuánticos.
- 2) los enlaces químicos cambian por las fuerzas internas y externas a que están sometidas las moléculas: el medio y su estado, las características de las moléculas en estudio, su geometría y la longitud de enlace además los factores como presión,

temperatura, etc y otras moléculas en interacción hacen que se rompan o ésta geometría cambie o se rompa el enlace

- 3) Cambian debido al medio circundante, tornándose cambiante y energente
- 4) Los enlaces químicos varían según las características de los átomos que formen la molécula. La formación de moléculas o redes, depende directamente las propiedades de los elementos que las compongan. Debido a esto se conocen diferentes tipos de enlaces (iónicos, covalentes y metálicos)
- 5) La principal razón es por la electronegatividad, si en el medio circundante aparece una molécula con mayor electronegatividad esta puede favorecer la ruptura de una molécula con menor atracción entre sus átomos.
- 6) existe reacomodación electrónica cuando se cambian los cuantos de energía, afectando las partículas que conforman el enlace y por ende la estructura que estos forman.
- 7) Al haber cierto tipo de interacciones energéticas se puede producir una alteración de dicha forma de enlazar un átomo o molécula, las frecuencias electromagnéticas que están interactuando con las partículas hacen que las partículas aumenten la excitación en sus últimos niveles de energía y pueda a llegar a estabilizarse dicha entidad.
- 8) las condiciones energéticas durante los arreglos atómicos
- 9) los enlaces cambian directamente en relación a su potencial electroengativo, de tal forma que se caracterizan en iónicos o metálicos cuando la diferencia es amplia y notoria promoviendo un estado de circulación electrónica (polaridad); cuando no es significativa es equilibrado por lo cual la nube electrónica es centrada (apolar) siendo covalente y en los enlaces de Vander Walls la inestabilidad electrónica hace que los enlaces sean muy débiles por lo cual los átomos tienden a rotar
- 10) Los enlaces químicos varían de acuerdo con la modelación espacial de la molécula además de pensar en una reorganización de las mismas después de una reacción química diferenciales eléctricos.
- 11) Esta pregunta no es clara.
- 12) Cambios en la reacciones químicas, en los tipos de enlace.

¿Qué evidencias (medidas, cálculos, registros) se tienen de las entidades que mencionó anteriormente?

- 1) Técnicas analíticas en donde se ha evidenciado el comportamiento de los espines cuando son puestos en un campo magnético.
- 2) la geometría de muchas moléculas y la longitud de enlace, el cálculo de los radios covalentes dados en picómetros y los ángulos de enlace .
- 3) Las fuerzas intermoleculares, dispersiones, inducciones y momentos intermedios energéticos.
- 4) se cuenta con datos como longitudes de enlace, Energías de enlace, densidades de carga entre átomos que forman un enlace
- 5) Los registrados por la tabla periódica o tabla específicas de cada propiedad.
- 6) las medidas evidenciadas sobre dichas partículas son de índole teórico, confirmados en los trabajos experimentales con los aceleradores de partículas.
- 7) Estudios que se basaron en las investigaciones de Louis de Broglie, principio de incertidumbre.
- 8) diría que las manifestaciones energéticas producto del rompiendo de los enlaces de los átomos, es decir, energía del enlace.
- 9) Otro concepto la química cuántica, sin embargo es un terreno que no soy muy

experto.

- 10) los experimentos de pilas voltaicas, los experimentos de síntesis orgánica y los experimentos de Vander Walls
- 11) Valores como la carga del electrón desde la experiencia de Milikan
- 12) evidencias empíricas. RMN

Mencione brevemente los trabajos científicos que permitieron obtener estas evidencias.

- 1) Trabajos elaborados físicos (La verdad, no me acuerdo :))
- 2) Para el cálculo de las distancias entre los cationes y aniones del compuesto $\text{YBaCuO}_{2.37-x}$ se utilizó el programa Bond Valence Wizard, versión 2.01 (2001); Se compararon las distancias interatómicas obtenidas con las canónicas de J. D. Jorgensen et al , y las posiciones atómicas fraccionarias refinadas mediante el método de Rietveld de una muestra de YBaCuO preparada por el método de sol gel
- 3) A new C–C bond formation model based on the quantum chemical topology of electron density
- 4) Dative Bonds in Main-Group Compounds: A Case for More Arrows
- 5) The chemical bond in inorganic chemistry: the bond valence model, 2nd ed.
- 6) Muy buena pregunta, la verdad conozco las teorías pero no he indagado respecto al trasfondo experimental de las medidas anteriormente mencionadas. Sería bueno hacer la reconstrucción histórica en aras de manejar mejor la temática. Pregunta muy reflexiva la verdad, me impactó :)
- 7) Una letra.
- 8) Dalton, Lewis, Langmuir y los aportes cuánticos.
- 9) El principio onda partícula y la ecuación de la onda de Schrödinger.
- 10) Linus Pauling, Lewis
- 11) Vander Walls, Kekule, Rutherford, Rayos catódicos para el electrón
- 12) Cuántica.
- 13) Análisis espectral, RMN y demás técnicas instrumentales.

¿Qué propiedades periódicas como electronegatividad, valencia, afinidad electrónica, potenciales, radios, etc., son definitorias en la formación de los enlaces químicos?

- 1) Considero que todas se involucran en la formación de un enlace químico.
- 2) Todas estas propiedades son determinantes en la formación de enlaces.
- 3) Electronegatividad, potenciales y radios
- 4) Todas las anteriormente mencionadas están relacionadas con los enlaces químicos. Aún así las que más se tienen en cuenta al momento de hablar de enlace químico como una densidad de carga entre átomos son: Energía de ionización, Afinidad electrónica y electronegatividad. Si se estudia por la parte de orbitales también es necesario integrar valencias y cálculos de los 4 números cuánticos, al igual que la ecuación de Schrödinger
- 5) electrones de valencia y electronegatividad
- 6) potenciales de energía, afinidad electrónica.
- 7) considero que hay que tener una buena base conceptual de dichas propiedades periódicas, ya que son fundamentales para entender los fenómenos de enlazamiento químico.
- 8) La afinidad electrónica
- 9) si ya que estas definen la capacidad en la formación de los enlaces

- 10) Una propiedad olvidada como lo es la afinidad química
- 11) ninguno
- 12) Todas las mencionadas influyen en mayor o menor medida, pero la electronegatividad tiene gran relevancia.

¿Qué leyes rigen el fenómenos del enlace químico?

- 1) Dualidad partícula- onda
- 2) ley del octeto, estructura de Lewis.
- 3) Atracciones, repulsiones, transferencias, compartimientos electrónicos, etc.
- 4) Ha de tenerse presente los principios y postulados de la mecánica cuántica
- 5) Probablemente la Ley del octeto y las Leyes cuánticas
- 6) periodicidad química (con excepciones) y conservación de la energía.
- 7) Desde la ley del octeto, hasta las leyes de la mecánica cuántica.
- 8) Ley periódica
- 9) la ley del octeto, ley de Coulomb
- 10) Leyes relacionadas con cargas como coulomb
- 11) no sé
- 12) No creo que se pueda hablar de leyes, más bien de factores: distribución electrónica, radios iónicos, electronegatividad, etc.

¿Qué importancia ha tenido la descripción de la naturaleza de los enlaces químicos que usted ha descrito hasta el momento, en la idea de la estructura molecular y su funcionalidad en la química?

- 1) Por el concepto de enlace químico se estructura todo el funcionamiento de la química. El desarrollo de sustancias químicas se debe a la interacción entre diversos átomos.
- 2) reflexionar acerca de la importancia de profundizar acerca de la naturaleza del enlace actualmente .
- 3) El enlace químico define la apariencia y naturaleza estructural de los materiales, generando desde su estudio las características y usos de los materiales.
- 4) El desarrollo de estos modelos ha permitido adentrarse en la naturaleza íntima de las sustancias. Permite predecir la formación de compuestos y la síntesis de muchos nuevos. La química cuántica ha aportado al desarrollo tecnologías como los celulares de última generación o el computador portátil en el que me encuentro respondiendo a este cuestionario
- 5) Todo lo descrito anteriormente permite visualizar como es posible que ocurran las reacciones químicas.
- 6) es definitiva, posibilita la predicción de sustancias químicas y sus propiedades específicas
- 7) Es bastante importante tener en cuenta la naturaleza no sólo de los enlaces sino de cualesquiera de los fenómenos químicos que suceden en la naturaleza ya que al momento de tener claro como es la interacción energética en un enlace se puede estructurar de una mejor manera lo que se está aprendiendo.
- 8) La importancia radica en explicar el comportamiento químico relacionado con las interacciones entre los electrones de átomos distintos, su funcionalidad ha sido en las explicaciones a los fenómenos, por ejemplo, los electrostáticos.
- 9) bastante ya que la naturaleza intermolecular es la que genera las interacciones molares, moleculares y atómicas en la formación de la naturaleza de los materiales

- 10) cuestionarse sobre el carácter ontológico del enlace químico, además de buscar explicaciones químicas del enlace que permitan alejarse de las concepciones físicas del mismo.
- 11) no entiendo esta pregunta
- 12) Es enlace químico es un constructo estructurantes de la ciencia química y como tal merece toda mi atención.

¿Existen las entidades que usted describe?, teniendo en cuenta que la descripción de muchas de estas es teórica.

- 1) Los postulados teóricos han permitido deducir el comportamiento real que presentan algunas sustancias. De esta manera, podría decir, que es necesario tener conceptos teóricos que le otorguen valor a los fenómenos físicos que se han evidenciado como lo son el comportamiento de los electrones en la formación de un enlace, las interacciones entre los átomos y la energía que se libera o consume en un proceso de estos.
- 2) las entidades existen en la naturaleza a nivel macroscópico y a nivel microscópico pero se evidencia dificultad e incredulidad a lo no tangible.
- 3) Obviamente que existen un ejemplo de ello es la síntesis de diamantes a partir de Carbono, que ante las condiciones ideales de producción, replican propiedades generadas desde el medio natural.
- 4) La respuesta está en la misma pregunta. Lo que se han establecido son modelos teóricos que describen las propiedades y dinámicas de partículas que no podemos observar. Lo que se puede asumir es que estas entidades existen hasta que llegue una teoría mejor fundamentada que explique que la naturaleza de los enlaces no funciona así. Por otra parte la llegada de los microscopios como el de efecto túnel podría ayudar a esclarecer, reformular o ampliar las teorías existentes.
- 5) La mayoría de los conceptos químicos se basan en representaciones simbólicas, con las cuales se acerca a los planteamientos teóricos, en términos más prácticos, se puede asumir que la energía y el electrón existen, este último no como partícula sino como energía.
- 6) si existen, aunque sean teóricas, facilitan y justifican la explicación de diferentes fenómenos de la naturaleza.
- 7) Pues existen modelos matemáticos que se aproximan bastante al comportamiento del enlace químico, sin embargo no hay evidencia microscopia de realmente la trayectoria ni de la interacción de dichas partículas subatómicas.
- 8) en el plano químico, la existencia de estas entidades es ineludible.
- 9) si existen ya que a partir de estas se tiene la certeza en la síntesis química
- 10) No, se parte de una evidencia para construir significados.
- 11) no
- 12) La existencia teórica también es válida, no solo la empírica. Claro que existen.

¿Por qué los modelos teóricos provenientes de la mecánica cuántica, como lo son TEV (Teoría del Enlace de Valencia) y TOM (Teoría del Orbital Molecular) alcanzan resultados teóricos de energía de enlace más aproximados a los resultados experimentales, a comparación de los modelos clásicos de enlace químico (Lewis y Langmuir)?

- 1) Considero que se ha tenido mayor avance en estos xq se ha logrado demostrar haciendo uso de tecnicas de mayor resolucion. Los modelos experimentales posiblemente han tenido algunas dificultades, como establecer condiciones ideales apra que los modelos sean optimos
- 2) Porque son mas demostrables mediante el uso de la tecnología.

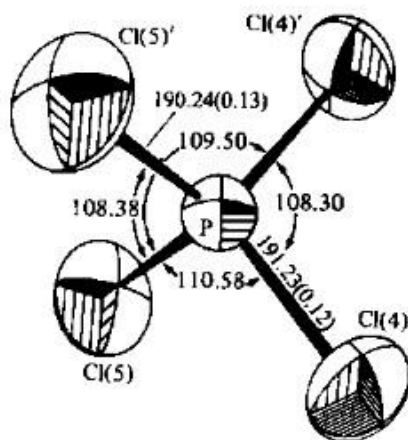
- 3) Debido a la descripción realizada desde la naturaleza atómica.
- 4) Porque la mecánica cuántica tiene amplio desarrollo y campo teórico en las dinámicas de las partículas subatómicas. Dado que en los enlaces químicos interactúan partículas de esta índole, la cuántica se convierte en la mejor forma de interpretar los enlaces químicos, pues se aproxima de forma muy eficiente al universo de lo submicroscópico.
- 5) Posiblemente esto se deba, a que abarcan aspectos cruciales en el comportamiento del átomo, como es el caso de los orbitales y su hibridación o solapamiento, según la teoría que se estudie.
- 6) debido a la utilidad en explicar la formación de enlaces químicos en la mayoría de sustancias, pues los otros solo se aproximan a la explicación de enlaces de índole iónico y covalente, aun cuando en numerosos casos pueden suceder los dos, teniendo en cuenta el momentum energético.
- 7) Considero que los modelos clásicos han ayudado a sentar una base teórica de apoyo frente a los otros modelos, no lo veo como una comparación en resultados exactos sino como una evolución histórica de teorías que de una u otra manera le aportan de manera significativa el estatus que hoy en día esta logrando el concepto de enlace químico.
- 8) la inclusión de algunas variables que el modelo clásico de enlace químico no tuvo en cuenta, además del desarrollo de otras ciencias que han servido de argumento para el avance científico, pero desconozco de estos.
- 9) obviamente porque estas teorías están construidas sobre los modelos clásicos superando las limitaciones de los mismos a partir del avance tecnológico y demostrativo en la construcción del conocimiento químico
- 10) Considero que la propuesta de Lewis da cuenta de los algunos enlaces químicos partiendo de una visión estructural, lo que dista de un marco teórico mas matemático que si poseen las propuestas desde la mecánica cuántica.
- 11) por la entidades.
- 12) Justamente por la posibilidad de cuantificar energéticamente tales interacciones.

Opine brevemente sobre las siguientes imágenes:

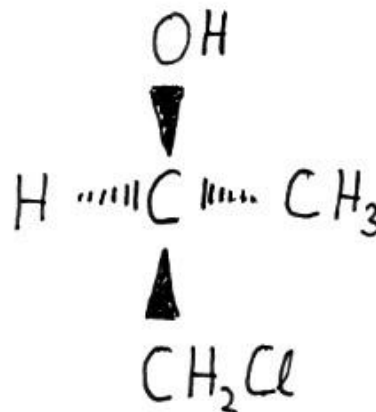
"Las leyes físicas fundamentales necesarias para la teoría matemática de una gran parte de la física y la totalidad de la química [son] completamente conocidas desde la mecánica cuántica" (Dirac 1929) (Tomado y adaptado de Lombardi y Labarca, 2010)



Paul Adrien Maurice Dirac (1902-1984)



a) Estructura molecular proveniente de datos espectroscópicos y cálculos químico-cuánticos



b) Estructura molecular proveniente de estructuras conceptuales clásicas de la química.

- 1) El conocimiento empírico ha permitido llegar a hacer deducciones que han sido confirmadas o refutadas haciendo uso de herramientas mas actuales. A partir de el diseño de estructuras moleculares haciendo consideracion de su estereoquímica ha sido posible determinar por tecnicas mas avanzadas angulos de enlace, tipos de union e interacciones químicas y físicas entre átomos.
- 2) Son más confiables las estructuras en las que la tecnología y equipos han sido utilizados. Los datos obtenidos a través de la espectroscopia establecen parámetros de estudio concretos que inciden en el estudio, funcional y aplicación de los materiales.
- 3) Las estructuras moleculares provenientes de la química clásica posibilitan las bases de réplica molecular desde la síntesis orgánica u otros medios.
- 4) Las imágenes ponen de manifiesto la transformación en los modelos de representación de los enlaces químicos en donde (b) expone la singularidad de los modelos clásicos y (a) la complejidad que le aporta la inclusión de mecánica cuántica a las formas de interpretar la naturaleza de las sustancias. La cita de Dirac presenta de forma clara la necesidad de interpretar la química en términos

modernos, es decir a partir de la mecánica cuántica.

- 5) Las dos imágenes son acertadas, y explican la orientación espacial de los enlaces según la naturaleza de las moléculas y átomos presentes, evidentemente la imagen de la izquierda aborda datos más precisos que la imagen de la derecha, ya que en esta la representación de los enlaces solo dan indicio de su orientación espacial más no de su ángulo.
- 6) Se espera que las explicaciones del enlace químico se ajusten a la autonomía de la química como ciencia, y no seguir en los fisicalismo de la misma, aunque algunas de las leyes y formulaciones en la física logren ajustarse a ciertas explicaciones del enlace químico en particular.
- 7) Claramente se observa en las imágenes los grandes aciertos que bajo evidencias teóricas y científicas se han aproximado a la explicación gráfica y descriptiva de la estructura atómica de algunas moléculas.
- 8) nos muestra por un lado la afirmación que género un debate filosófico y reducción de la química, y las representaciones de compuesto químicos desde dos perspectivas teóricas.
- 9) a medida que el tiempo avanza el hombre siempre cree haber encontrado la respuesta a todas las inquietudes y de ahí la modelización de la ciencia y la química no es la excepción
- 10) La complejidad de los modelos varía desde la matematización del mismo y el uso de instrumentos que responden a una carga teórica prevista.
- 11) no es reducible, para la química es más funcional la de la derecha.
- 12) Deseable haber mostrado comparación de modelos para el mismo tipo de molécula. Si bien es ciertos ambos modelos proporcionan información relevante y complementaria, ninguno muestra la verdad absoluta. No son más que eso, modelos.

Realice un breve argumento sobre lo siguiente: El formalismo matemático de la ecuación de Schrödinger y los principios mecánicos-no clásicos niegan la existencia de algunas de las entidades que aparecen en los modelos clásicos de enlace químico. Estas ecuaciones, hechas para describir moléculas son más precisas y funcionales al abandonar los supuestos clásicos de la naturaleza de entidades. Sin embargo, muchas de estas hoy en día no se pueden resolver por su complejidad. Para solucionarlas, los químicos teóricos introducen supuestos clásicos de existencia de las entidades como en TEV y TOM. Según Pauling (1931), esta gráfica es el resultado de las soluciones de las eigenfunciones o funciones de onda cuánticas combinadas de los orbitales enlazados en una posible molécula que tiene contiene carbono (CX₄).

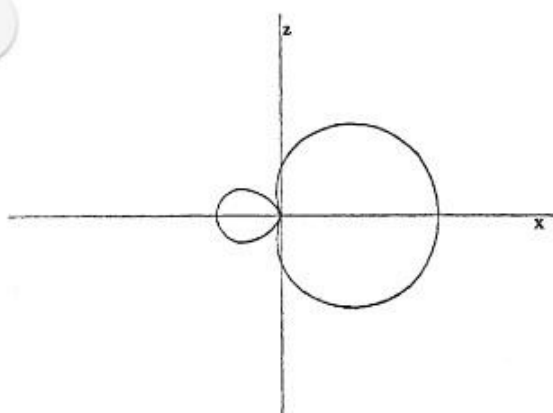


Fig. 3.—Polar graph of $|\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sin \theta|$ in the xz plane, representing a tetrahedral eigenfunction, the best bond eigenfunction which can be formed from s and p eigenfunctions.

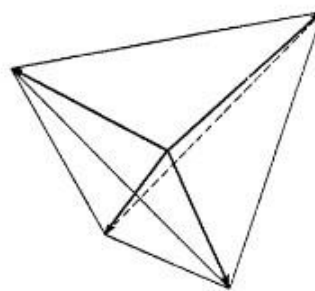


Fig. 4.—Diagram showing relative orientation in space of the directions of the maxima of four tetrahedral eigenfunctions.

¿Por qué las representaciones simbólicas de las entidades de los enlaces químicos y su estructura siguen siendo vigentes y funcionales y además útiles en los modelos cuánticos de enlace?

- 1) Por qué han sido modelos que minimizan la complejidad del tema. Permiten hacer una aproximación más real de una estructura a un estado macroscópico.
- 2) El desconocimiento de la tecnología, equipos e instrumentos que se han venido utilizando han evolucionado a gran velocidad y frente a un modelo clásico parece ser más fácil llegar a la comprensión de acuerdo al grado de exigencia atención importancia y grado de complejidad para la comprensión, además para quien esté dirigida la información y el interés.
- 3) Hasta el momento han sido útiles, muestran demostración existencial ejemplificada desde la construcción y obtención materiales sintéticos a partir de las características estudiadas.

Me aventuraría a pensar que este ajuste matemático puede ser funcional hasta que se encuentre evidencia de lo contrario. Por ejemplo, en las representaciones de los orbitales atómicos no se ha observado o evidenciado que efectivamente tengan esas formas. La interpretación de las disposiciones electrónicas puede gestarse desde los números cuánticos, pero no se puede asegurar que los movimientos de los electrones o las zonas de probabilidad donde se pueden encontrar, sean en la naturaleza así como se han venido representado los orbitales.

- 4) Porque son planteadas a partir del modelamiento matemático y su equivalente proyección gráfica, por lo cual permiten asumir valores exactos de la distancia del enlace o de la interacción entre átomos.
- 5) porque permite explicar y/o predecir las propiedades de las sustancias, aunque es necesario aclarar que muchas de las formas simbólicas y geométricas en solo dos dimensiones no posibilitan lo anteriormente dicho.
- 6) Considero que siguen siendo vigentes en la medida que son representaciones aceptadas por la comunidad