

# ESTRUCTURA Y ENFOQUES DE LA QUÍMICA

*Ariel H. Guerrero*

*José L. Costa*

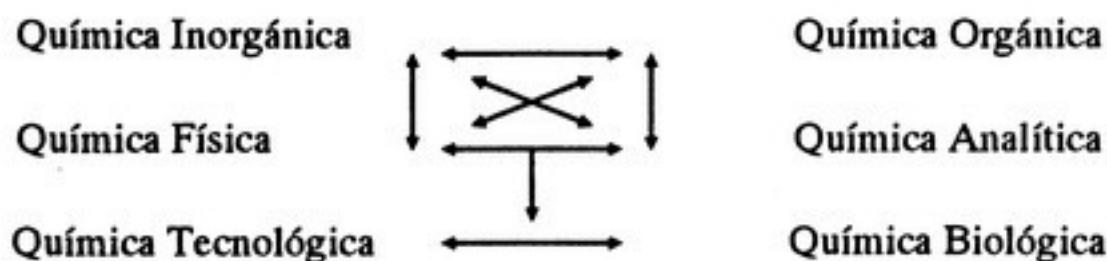
*Héctor J. Fasoli*

## 1. Presentación: estructura

La Química es la disciplina de la ciencia que estudia la **composición y cambio de composición** de los sistemas materiales, es decir, los que poseen masa.

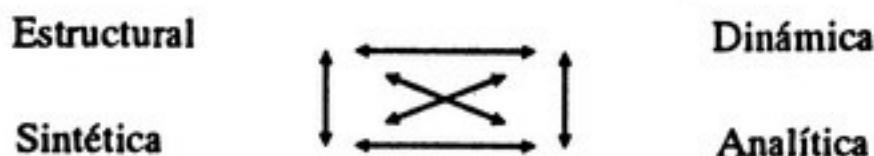
Esto implica el estudio de las sustancias puras, sus configuraciones, transformaciones e interacciones energéticas, temas en que se superpone - aunque no totalmente- con la Física.

La estructura convencional de la Química mantiene vigencia y nosotros hemos propuesto el siguiente diagrama para cualquier plan de enseñanza-aprendizaje (ver Apéndice A) sobre sus bases.



esquema que insinúa apenas un orden sucesivo, pero no lo impone.

Las propuestas modernistas, como la de Westheimer y Hammond, han intentado un cambio profundo en la estructura de la química, despojándola de la nomenclatura tradicional enunciada en el párrafo anterior, mediante un criterio muy diferente de clasificación en tres grandes categorías de asignaturas: estructural, sintética y dinámica. No parece haberse difundido lo suficiente, pero consideramos que es sumamente útil para clasificar los temas de cada programa, sea de una materia particular o de conjunto de asignaturas en la estructura general, de acuerdo con el siguiente esquema:



en el que hemos incluido la vía analítica, indispensable en todo estudio científico (ver Apéndice B).

Cualquiera sea la estructura elegida, puede ser estudiada con enfoques variados, los cuales imponen técnicas y métodos apropiados y, en muchos casos, específicos. Sugerimos ocho enfoques básicos que desarrollaremos a continuación:

- |                       |                             |
|-----------------------|-----------------------------|
| 1. Conceptual         | 5. Informático              |
| 2. Experimental       | 6. Cibernetico-Sistémico    |
| 3. Matemático         | 7. Predictivo               |
| 4. Quántico           | 8. Metodológico e Histórico |
| 9. Integral Unificado |                             |

enfoques que pueden ser utilizados por separado o bien combinados parcial o totalmente en el 9.

## 2. Enfoques: estilos de estudio

### 2.1. Conceptual

Es relativamente fácil seleccionar una lista de conceptos básicos que se mantendrán en los planes y programas durante varias décadas del siglo XXI (ver Apéndice C). Las diferencias sólo aparecerán en cuanto a las prioridades y al orden, en cada nivel.

En cualquier caso, la meta es entender los significados mediante la coordinación de las secciones clásicas:

- a) Hechos y principios básicos
- b) Modelos conceptuales: formales y materiales
- c) Problemas: conceptuales y cuantitativos
- d) Aplicaciones a la "vida real".

Si estas mismas secciones son las que se utilizan en los colegios y liceos de la enseñanza media, los cursos básicos de la Universidad podrán levantar su nivel y cambiar sus programas, introduciendo tempranamente enfoques que, en la actualidad, no son tratados ni siquiera en los cursos superiores, por ejemplo, el predictivo y el sistémico-cibernetico; y fortificando la preparación matemática.

## 2.2. Experimental

A partir de la mitad de nuestro siglo, finalizada la Segunda Guerra Mundial, era predecible que ciertas tendencias insinuadas antes iban a instalarse definitivamente como técnicas experimentales y para el tratamiento de datos<sup>1</sup>.

- Métodos instrumentales con toda amplitud
- Microtécnicas, meso - para rutina
- Estandarización y automatización
- Métodos estadísticos: ensayos de hipótesis, análisis de variancia, diseño de experimentos, muestreo.

No anunciadas con tanta anticipación, pero existentes y con un gran potencial que se desarrollaría enormemente hasta dominar el campo, se construyeron las primeras computadoras que hoy constituyen un enfoque propio (ver sección 5). El osciloscopio es otro instrumento fundamental pero no ha tenido la difusión que merece en los cursos básicos ni en la formación general.

El uso de microtécnicas es el resultado de extrapolar la obra de los grandes precursores: Emich, Benedetti-Pichler y Feigl, en general, y Pregl en microanálisis cuantitativo orgánico. La lista actual es numerosísima, sin embargo es imposible dejar de mencionar a Kirk (discípulo de Benedetti-Pichler) en relación con el ultramicroanálisis en el nivel del microgramo para el análisis del plutonio destinado a la bomba nuclear (1945); y a Conway, creador de la famosa cámara de microdifusión y de las técnicas microvolumétricas correspondientes. Como escala intermedia, llamada originalmente semimicro y actualmente meso, fue introducida tempranamente en nuestro país el curso básico de Química Analítica Qualitativa (1946) por el Prof. Arnoldo Ruspini: no tuvo la difusión merecida en otras asignaturas y quedó circunscripta al curso de Microanálisis que introdujimos en el plan de la Orientación Analítica (1969) de la Licenciatura en Química de la Fac. de Ciencias Exactas y Naturales y dirigimos hasta su extinción en 1988. De esa manera existen muchas técnicas sencillas y económicas en tiempo y dinero que han sido relegadas al archivo del olvido: papel de filtro como soporte material de las reacciones químicas, filtración bajo presión con la técnica de Barber, y su aplicación analítica cuantitativa por Winkler; jeringas de inyecciones como cámaras de reacción y con salida capilar de vidrio o metálica para su uso como buretas gravimétricas con errores en precisión inferiores a 0,01%; piretas (pipeta-bureta) construidas sobre la base de pipetas de 2 ml graduadas a la centésima; etc.

Sin embargo, la presión económica ha influido lentamente para que, imitando a los países desarrollados, se difunda la búsqueda de técnicas ahorrativas. Ello desemboca inexorablemente en la adopción de experimentos sencillos (técnica simple, meso a micro, materiales poco costosos), aunque las reacciones sean complejas, y el retorno a las mostraciones experimentales

para clases numerosas, como alternativa balanceada de las clases de laboratorio en que los alumnos son sujetos de la experimentación personalizada.

Finalmente, el ahorro lleva también a la unificación por bloques de métodos, la cual se refleja en el enfoque integral que describimos en la sección 2.9.

### 2.3. Matemático

"La matematización de la ciencia puede ser considerada un hecho, pero los niveles y métodos para matematizar a los científicos merecen una profunda discusión". Así lo hemos sostenido en diversas publicaciones acerca de la formación matemática más conveniente para los químicos.

En un extremo se encuentran las instituciones de nivel terciario y universitario que ofrecen dos cursos completos -a lo sumo tres- de Matemática, en cuyos programas aparecen: resolución de ecuaciones hasta grado n, sistemas de ecuaciones, cálculo gráfico y nociones de geometría analítica, cálculo diferencial e integral, ecuaciones diferenciales, y nociones sobre cálculos vectorial, tensorial y matrices. Aunque incluyan ejercicios de aplicación química, tienen dos inconvenientes: son necesariamente tempranos en la carrera, por lo que resultan desconectados de sus aplicaciones más importantes en asignaturas de cuarto y quinto año y, aún en las mejores condiciones, no están adecuadamente coordinados con los temas químicos correspondientes, por lo que puede afirmarse que "la química universitaria nunca ha extraído todo el provecho posible de la enseñanza matemática básica", tal como puede percibirse en el excelente texto de Mellor: **Higher Mathematics for Chemists**. La situación es peor aún respecto de los cursos de Física, donde se pretende a veces enseñar mediante cálculo diferencial cuando el estudiante apenas maneja diferencias finitas.

En el otro extremo están quienes han decidido enseñar los instrumentos matemáticos, a medida que se los necesita, como parte de los cursos de Química.

Nosotros hemos optado por la primera tendencia con dos cursos básicos anuales, complementados en cursos específicos de tercer año, que hemos llamado: "Métodos Estadísticos para la Experimentación" e "Introducción al Estudio de la Química Física" en la cual, prácticamente, sólo incluimos los instrumentos matemáticos para: ajuste de curvas, derivadas parciales en funciones energéticas químicas (termodinámicas), cálculo diferencial e integral en cinética química, nociones de energía estadística y de química cuántica. Durante ese tercer año se inicia el curso sistemático de Informática Química que incluye, naturalmente, una proporción sustancial de matemática aplicada.

El estudio específico de los métodos estadísticos para la experimenta-

ción es un soporte matemático no sólo para la investigación científica sino también para la tecnológica y el ejercicio profesional<sup>1</sup>. Constituye además un criterio eficiente para interpretar hechos de la vida diaria e institucional. Volveremos sobre ese tema al tratar **quimimetría** (ver sección 5).

Los equilibrios iónicos se han reunido y ampliado en lo que podemos llamar "álgebra química" iniciada por Oswald a principios de siglo, notablemente expresada por T.B. Williams en **Analytical Processes**, de los años cuarenta, y floreciente en el texto de Butler y otros autores de similar tendencia. De manera complementaria aparecen los métodos gráficos difundidos de manera general por Sillen, Rysselberg, Pourbaix y Ellingham, y específica por Charlot y Santiago Vicente Pérez. Pensamos que en la metodología de la enseñanza los métodos gráficos es una herramienta fundamental para lograr la comprensión por los alumnos, cualquiera sea el tema.

Una guía hacia enfoques matemáticos unificados está dada por la serie de curvas fundamentales obtenidas por derivación sucesiva de la escala de ordenadas en función de la misma variable, en todos los casos.

#### "Conductimétrica"

$$y = f(x)$$

#### "Potenciométrica" $(dy/dx) = f(x)$

$$\log y = f(x)$$

#### "Gaussiana"

$$(d^2y/dx^2) = f(x)$$

$$d(\log y)/dx = f(x)$$

#### "Pulso"

$$(d^3y/dx^3) = f(x)$$

$$d^2(\log y)/dx^2 = f(x)$$

Los nombres corresponden a métodos instrumentales utilizados en Química y, además de esa homogeneidad obtenida por derivación en un sentido y por integración en el opuesto, es notable el paralelismo formal entre la derivada y el logaritmo para la curva potenciométrica, con ventaja por la amplitud del salto en el "punto final", para el logaritmo. Esto favorece con un argumento teórico lo que Sörensen adoptó empíricamente al definir pH. Esta idea fue originalmente desarrollada por el gran investigador austriaco Benedetti-Pichler, en la magistral presentación de su libro **Essentials of Quantitative Analysis**. A partir del segundo curso universitario de Matemática, los químicos deberían ser preparados mediante un profundo análisis de este conjunto de curvas, más la integración teórica consiguiente.

La unificación por gráficos conduce naturalmente a los tridimensionales utilizados por Reilly y que a partir de la informática tienen magnífica perspectiva, así como los de cuatro variables, tres en abscisas como gráfico triangular y la cuarta en ordenadas (ver sección 5).

## 2.4. Quántico

Nacida en 1901 como artificio formal utilizado por Planck para optimizar su ecuación del espectro de emisión del cuerpo negro, la constante  $\hbar$  iba a recorrer lentamente el primer decenio con sólo un éxito en su favor: la aplicación por Einstein para interpretar fotónicamente el efecto fotoeléctrico. Pero cuando Bohr explicó, por medio de su modelo atómico y las tres ecuaciones de su teoría (1913), los factores subyacentes en la constante R de Rydberg, empírica hasta ese momento y calculó los estados excitados del espectro de hidrógeno, terminó la etapa de incubación (umbral) y comenzó la exponencial. Para ajustar el modelo de Bohr y generalizarlo, Sommerfeld agregó suborbitales elípticos (1915) lo cual se coordinó con la distribución electrónica propuesta por Stoney. El nuevo modelo combinado de Bohr y Sommerfeld tuvo gran aceptación y dominó el ambiente científico hasta que terminó la primera etapa "mecánica", para dar lugar a la "ondulatoria" hacia 1926. El precursor de ese cambio fue Luis de Broglie (1924) quien generalizó el principio de dualidad onda-partícula, unificada como ondícula, lo cual encontró apoyo experimental cuando Davisson y Germer lograron la difracción de los electrones (1927). Hacia 1925 Heisenberg y en 1926 Schrödinger desarrollaron sus modelos físico matemáticos del átomo mediante la **ecuación de onda** correspondiente, con lo cual esta etapa exponencial tomó su pendiente casi vertical. Para 1927 la teoría cuántica estadística definió bosones y fermiones como distribuciones diferenciadas de partículas. El escenario estaba preparado para la Química Cuántica cuyo primer gran texto<sup>2</sup> proviene de los cursos de Eyring en Princeton, iniciados en 1931.

Pero este extraordinario enfoque de la Naturaleza también cuenta con sus críticos. Kimball<sup>3</sup> por ejemplo señala: "...la razón por la cual pareció detenerse el avance (en 1935) es el hecho de que las cosas fáciles ya estaban hechas." "Fue descubierto entonces irrefutablemente que aún con las computadoras más poderosas las dificultades eran tan grandes que prácticamente no se podía hacer nada más". "...había una característica más bien notable que tenían en común todos estos cálculos: a partir de casi cualquier suposición extraña, incluyendo algunas que se sabe son definitivamente erróneas, al poner en acción una manivela matemática, surgen respuestas cercanas a la verdad, con una aproximación no mayor que 10%."

Aun así, lo anterior puede ser considerada una crítica formal. Pero Landé<sup>4</sup>, otro investigador cuántico de fama, es mucho más severo en sus objeciones de fondo: "Pero la innovación que plantea este libro consiste en señalar que los razonamientos puramente físicos que han conducido a la doctrina dualista usual contienen graves errores: la equivocación de esta teoría consiste en dejar de lado un elemento muy importante de la mecánica cuántica de par-

tículas, como lo es la **regla de quantización de intercambio del momento lineal**, tercera regla quántica de Duane (1923) que presenta una perfecta analogía con las reglas quánticas referentes a la energía (Planck) y al momento angular (Sommerfeld y Wilson). En realidad esa tercera regla ofrece una explicación completa de todos los fenómenos relacionados con el aspecto ondulatorio de la materia, entre ellos difracción y coherencia, sin que sea necesario usar fantásticas hipótesis acerca de partículas que se transforman ocasionalmente en ondas, o de manera equivalente, que se "manifiestan como haciéndolo". Realmente, la creencia en la naturaleza dual de la materia ha bloqueado todos los intentos para entender mejor la teoría quántica, fomentando la opinión que el estudiante, después de aprender las trickeyuelas matemáticas del oficio, llegará al final a "entender que no hay nada que entender" acerca del "por qué" en las leyes quánticas. Este libro constituye un enfrentamiento contra tal enfoque, puramente descriptivo..." "Repitamos una vez más: es absolutamente erróneo decir que de acuerdo con la Física moderna el electrón es una **ondícula, mitad onda y mitad partícula**".

Es que las posiciones filosóficas -ideológicas deberíamos decir- de los químicos y de los físicos frente a la Naturaleza son netamente diferentes. No por casualidad existió la alquimia y no la "alfisia". La Física se matematizó mucho antes que la Química, y no se puede decir que existe ejercicio profesional independiente de la Física. Pero las líneas epistemológicas son aún más divergentes: la mayoría de las leyes básicas de la Química tienen origen empírico, pues han sido enunciados por una traducción inductiva, a partir de los hechos experimentales con que logramos que nos informe el "Libro de la Naturaleza". Así, la ley de proporciones múltiples y la de combinaciones gaseosas son productos típicos de inducciones simples. Si bien en toda ley científica siempre se puede identificar algún eslabón que la vincula con hechos conocidos previamente, en Física es más común que en Química postular ciertas proposiciones y luego deducir de ellas otros modelos, leyes y diseños experimentales. Un ejemplo que abarca ambos caminos es la constante de Rydberg, propuesta inductivamente para que el modelo matemático

$$\bar{v} = Ry \left[ \left( \frac{1}{n_1^2} \right) - \left( \frac{1}{n_2^2} \right) \right]$$

( $\bar{v}$ : número de onda;  $n_1, n_2$ : números enteros) permita calcular las frecuencias (número de onda, longitud de onda, según el caso) de las radiaciones emitidas, inicialmente por el átomo de hidrógeno y luego por cualquier elemento. Cuando en 1913, Bohr deduce de sus postulados que esa constante Ry resulta de una relación entre los valores numéricos de ciertos parámetros de la Naturaleza, se puede decir que ha sido "redescubierta" deductivamente.

La teoría quántica se desarrolló sobre la base de postulados, a pesar de que la constante  $h$  de Planck tiene origen empírico. Esos postulados fueron

elaborados mediante analogías y tanteos guiados por el "postulados de correspondencia". De esta manera surgieron distintos conjuntos válidos de postulados, entre los cuales ha predominado el que impone la analogía entre partículas y ondas, dualidad onda-partícula, discutida anteriormente. De allí surgió la escuela cuántica oficial que propone leyes probabilísticas frente a las deterministas, clásicas. Vale la pena citar el comentario de Alberto Einstein contra el azar como factor -o no factor- causal: "La mecánica cuántica... dice mucho, pero realmente no nos acerca al secreto de Dios. Yo, de todos modos, estoy convencido que Él no juega a los dados". Por si fuera poco, insistió en que "Dios es sutil pero no mezquino" con lo cual se apartó de la ortodoxia cuántica, dirigida por Max Born, su organizador desde Göttingen en 1921.

En consecuencia, existen en la actualidad dos cuestiones en controversia:

- ¿Por qué elegir un conjunto de postulados y no otro? Por ejemplo, podemos interrogarlos sobre la exclusión del que aplica la quantificación del momento lineal.
- ¿Qué interpretación debe darse al conjunto de postulados elegido? Existen varias para los que están en uso.

A veces se da por sobreentendido que una predicción correcta de los hechos experimentales no garantiza que el modelo o ley sea válido. Así, que la tesis de la dualidad onda-partícula prediga la difracción de los electrones, y que ésta haya sido comprobado experimentalmente, no prueba que la tesis tenga validez. Es más, como ya hemos dicho, hay autores que consideran esa difracción como un efecto del medio material, geométricamente ordenado en cristales que imponen su periodicidad a las partículas incidentes, y no una característica que dependen de la naturaleza ondulatoria del electrón.

Por otra parte, resulta llamativo que si bien la teoría cuántica ha permitido elaborar métodos para diseñar la estructura de moléculas con determinadas propiedades y establecer caminos para su síntesis, con éxito predictivo; no ha sido posible, en cambio calcular la energía de disociación de una molécula sencilla con suficiente exactitud.

Las objeciones y controversias descriptas no deben ocultarnos las virtudes de la teoría cuántica como herramienta útil de la ciencia, a la cual ha contribuido con avances específicos. La optimización de sus aplicaciones en Química Física exige un nivel matemático mayor y mejor, con métodos originales desarrollados hacia fines del siglo XIX, cuando todavía no se vislumbraban sus aplicaciones potenciales. En esa línea, conviene distinguir claramente entre el modelo matemático y el sistema descripto, lema vigente que se refleja en nuestro plan de estudios en la asignatura del tercer año "Introducción al Estudio de la Química Física".

Entre el extremo contenido del "Ignoraremos" sospechoso de oscurantismo y el extremo iluminista del científico sospechoso de soberbia, que aspira a conocer nada menos que los planes de Dios, el enfoque cuántico tiende hacia éste por naturaleza propia, aunque es de esperar que esa tendencia será regulada por el surgimiento de una sabiduría auténtica.

## **2.5. Informático (Computación + teoría de la Información)**

Si alguna metodología influye por sí misma sobre los enfoques de las disciplinas científicas, la computación es la que más se ha destacado desde el momento inicial de su introducción. La característica fundamental que exalta esa influencia es el manejo de la complejidad. Una computadora, máquina electrónica calculadora programable con memoria, busca en sus archivos de información lo que le indica el operador, directamente y/o mediante el programa. Esa búsqueda puede consistir en millones de tanteos de aproximación, pero son tan rápidos que el total resulta dentro de plazos relativamente breves en cada caso.

En ese contexto, el aprendizaje comienza por el tecleo de instrucciones y comandos; dos idiomas como mínimo, BASIC y Pascal. De este último, sólo nociones en los cursos más elementales: manejo de archivos y otros sistemas de organización y resolución de ecuaciones aplicables a la disciplina.

En Química, así como en las otras disciplinas científicas, las aplicaciones matemáticas continúan en proporción significativa, y se agregan otros temas entre los que sobresalen:

- Gráficos: trazado y antitrazado (de la ecuación a la curva)
- Modelización: ajuste de ecuaciones a datos experimentales
- Simulación de experimentos: dado el modelo, similar influencia de condiciones variables sobre las transformaciones de sistemas materiales
- Identificación de estructuras (pautas): vía analítica para determinar estructuras de sustancias; o vía sintética en búsqueda de relaciones eficientes en el trío estructura-función-efecto, especialmente en medicamentos.

Para la enseñanza existen desde hace años sistemas interactivos de instrucción programada como el P.L.A.T.O. y de evaluación en que la computadora sustituye electrónicamente la máquina de enseñanza original de Pressey (1926).

Los instrumentos científicos han sido automatizados con programaciones que controlan los microprocesadores, computadoras específicas para cada tipo de instrumento.

Aunque rama genuina de la Matemática Aplicada por una parte y sección de lo sistémico-cibernetico por otra, se ha desarrollado una interdiscipli-

na llamada **Quimimetría** (Chemometrics) que comprende, según el esquema propuesto para un Magister de la Universidad del Salvador:

- Informática Química II
- Métodos Estadísticos
- Cálculo Numérico
- Quimimetría

Finalmente, es bastante común implantar el **Laboratorio Seco** (Dry Lab), por computadoras, en cursos básicos de ciertas universidades norteamericanas, lo cual es un excelente complemento, pero no sustituto, del curso experimental.

En definitiva, sea como auxiliar o como interdisciplina independiente, la informática marca una tendencia novedosa y de apertura hacia un nuevo enfoque de la Química .

## 2.6. Sistémico - Cibernetico

Durante las últimas cuatro décadas, la definición de sistema diferente a la suma de sus partes, surgió como concepto clave en el campo científico. Las ideas originales estaban maduras ya en 1939, pero su difusión fue posible recién después de 1945 bajo el título **Teoría General de Sistemas**<sup>5</sup>.

El propósito de esta teoría es enunciar los principios comunes a todos los sistemas con el fin de obtener técnicas para su investigación, descripción, y aplicación en casos específicos. Principios, leyes y modelos, correspondientes a los sistemas en general, constituyen el dominio de este enfoque interdisciplinario.

En el sendero hacia una teoría general de la organización, con la unidad de la Ciencia en mente, se han acuñado los conceptos fundamentales: isomorfismo (paralelismo), complejidad organizada, diagramas de flujo con cajas negras, interacciones entre subsistemas, análisis compartimental, equifinalidad a partir de estados iniciales diferentes que dependen del futuro para alcanzar una meta estable (regulada), sistemas abiertos y estados estacionarios.

Desde otro ángulo, Norberto Wiener creó, hacia el final de la Segunda Guerra Mundial, una nueva interdisciplina "de la comunicación y el control, tanto en las máquinas como en los seres vivos", a la que llamó **Cibernetica**<sup>6</sup>. En este marco, los conceptos de organización, regulación y comunicación se integran en el de información, unidad metodológica resultante. Por cierto que las aplicaciones precedieron al desarrollo teórico: servomecanismos simples, sistemas de control electrónico, reguladores químicos ("buffers") y ciertos juegos de azar, "hicieron cibernetica sin que se dieran cuenta sus inventores".

La primera idea definidamente cibernetica fue enunciada por el gran filósofo Claudio Bernard (1878) al señalar como fundamento de la Biología la tendencia de los organismos a mantener la constancia de su medio interno.

Esta idea fue desarrollada por W.B. Cannon (1926) quien acuñó la palabra **homeostasis** para ese tipo de regulación, cuya ecuación particular para ácidos y bases fue anunciada por L.G. Henderson (1908) y K. Hasselbalch, además de publicar el primero su clásico *The Fitness of the Environment* (1913). En 1922, Van Slyke definió la **capacidad reguladora**  $\beta$  para esa ecuación particular; luego L. Michaelis la extendió a sistemas redox y nosotros la hemos generalizado para cualquier sistema iónico, en solución o heterogéneo<sup>7</sup>.

Podemos distinguir en consecuencia, entre los dos grandes temas ciberneticos: **información y regulación** (interna o auto regulación, externa o control). La cantidad de información ha sido definida por Shannon (1948) como función negativa de la entropía (neguentropía) en los sistemas de comunicación, la cual ha sido aplicada para estimar la cantidad de información en estructuras químicas y biológicas. Así, la energía de organización asociada con estructuras químicas se expresa por medio de neguentropía, la cual manifiesta información con baja probabilidad ("ordenada"), mientras que el "ruido" en una comunicación es indicado mediante la entropía ("desorden homogeneizante") del mensaje. La descomposición de sustancias químicas y la senilidad de los sistemas biológicos provocan pérdidas de información, porque son procesos en los que moléculas complejas de sistemas más ordenados son convertidos en moléculas más pequeñas y menos informativas. Recíprocamente, la idea básica de la combinación de átomos es que se transforman en una molécula, por adquirir cierta cantidad de información al ordenarse, con un costo energético determinado.

Con respecto a la regulación de concentraciones -actividades, potenciales químicos- conocemos bien el efecto Le Chatelier (1888) en el desplazamiento de los equilibrios, cuando se modifican los tres factores intensivos: concentración, presión y temperatura, que influyen sobre las reacciones químicas.

Una línea intermedia, pero independiente, es la que tomó Jaime G. Miller (*Living Systems*, 1978) al estudiar los sistemas en siete niveles de menor a mayor complejidad, desde célula y órgano hasta sociedad y sistemas supranacionales. En cada nivel existen diecinueve subsistemas que procesan los intercambios de materia, energía, e información; es decir 133 estructuras en total, de las cuales sólo se encontraron 108 al comienzo, y gradualmente han sido descubiertas la mayoría de las restantes.

Las ideas novedosas de este enfoque van penetrando muy lentamente en el pensamiento científico actual y, mientras tanto, se produce la unificación sistémico-cibernetica, que de ninguna manera debería ser absorbida por la informática.

### 2.7. Predictivo

Predecir tiene en Ciencia un significado más cercano al pronóstico que a la profecía. Ni adivino ni iluminado, el "predictor científico" aplica un pensamiento circular que se puede considerar tautológico, pues cierra el ciclo de la inducción generalizada mediante un modelo, del cual se puede deducir consecuencias novedosas. Típico de este enfoque es el cálculo del cambio entálpico de una reacción química no estudiada experimentalmente a partir de un conjunto de reacciones conocidas, que adecuadamente ordenadas proveen la ecuación de la reacción incógnita. Los datos están en las premisas pero las conclusiones no habían sido reveladas anteriormente.

Algunos capítulos predictivos como la Clasificación Periódica y la aplicación de potenciales redox han sido incorporados a cursos básicos, aunque sin indicar la potencia y generalidad de este enfoque. Proponemos reunir todos los temas, estructurales y dinámicos, que pueden ser incluidos en dos módulos coordinados de un curso de integración, que en nuestro caso se trató como seminario (1979).

#### Química Predictiva

- |   |   |
|---|---|
| <b>1. Predicción de propiedades y estructuras</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>1.1. Clasificación Periódica</li> <li>1.2. Energías de ionización</li> <li>1.3. Electronegatividad</li> <li>1.4. Potencial iónico</li> <li>1.5. Uniones y geometría química</li> <li>1.6. Métodos espectroscópicos: espectro - estructura - propiedades</li> <li>1.7. Química Quántica: estructuras</li> </ul> | <b>2. Predicción de reacciones y procesos</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>2.1. Ciclos termodinámicos</li> <li>2.2. Constante de equilibrio: Le Chatelier</li> <li>2.3. Potenciales redox</li> <li>2.4. Espontaneidad energética: 2<sup>a</sup> ley</li> <li>2.5. Cinética química: caminos de reacción, catálisis.</li> <li>2.6. Métodos espectroscópicos: termo y fotoreacciones.</li> <li>2.7. Química Quántica: reacciones</li> </ul> |
|---|---|

Se puede extender a temas predictivos en estructuras y procesos de Química Biológica y Tecnológica.

Este tratamiento de la Química debe ser comprendido y aplicado por los docentes de nivel medio y universitario como autopista, luego de los cursos básicos, hacia la educación química y la creatividad científica. Permite reafirmar conceptos y modelos de asignaturas previas, introducir novedades en la interpretación, y promover eficiencia y originalidad en el Sistema Educativo. Las posibilidades del enfoque predictivo son impredecibles.

## 2.8. Metodológico e Histórico

Las técnicas y métodos disponibles serán condicionantes decisivos de la enseñanza y, por cierto, también de la Química. De la misma manera que en la actualidad tenemos cursos audiovisuales, "a distancia", y programados por computadora, se crearán cursos básicos "por entregas", como los viejos folletines, en diarios y revistas populares; cursos individuales en Centros de Recursos Múltiples y por videoteléfono. Esta tendencia impondrá ciertas características a la enseñanza que se reflejarán, a través del método, en los contenidos, fundamentalmente **economía de pensamiento y de transmisión de conocimientos**, mediante cuadros sinópticos, diagramas en espina de pescado, y de bloques-flujo; palabras y frases clave; paradojas y guías didácticas.

Una técnica muy interesante, usada actualmente en contados cursos superiores, se difundirá a los cursos básicos para una determinada proporción de temas: **las series de artículos de investigación seleccionados para su discusión en clase con participación de los alumnos**.

Las técnicas instrumentales en sus versiones primitivas serán el armazón sobre el cual reposará la estructura en bloques de temas para ciertos módulos de los cursos básicos. La vieja "colorimetría" de tubos de ensayos combinada con la técnica de **variaciones continuas**, el potenciómetro con resistencia de "hilo" y pilas-baterías pequeñas, conductímetros sencillos existentes en el mercado y aún polarógrafos, fáciles de armar sobre la base de un amplificador operacional marcarán las bases de futuros cursos. Sin olvidar los aparatos multifuncionales de bajo costo como el diseñado para UNESCO por el grupo de Krishna Sané.

Un enfoque lúdico, apenas aprovechado en la educación infantil, será aplicado en otros niveles, particularmente el medio. Juegos químicos de salón del tipo: "Ludo de la Clasificación Periódica", "Juguemos a Mendeleev", "Palabras cruzadas químicas" y "Predictor de reacciones" se unirán a la caja-laboratorio portátil y a los modelos atómicos-iónicos en escala, para reiniciar el surgimiento de este enfoque.

Finalmente, el enfoque histórico, corriente permanente aunque a veces subterránea de la educación química, debería ser incorporado como "chispa-zo" que ilumina el comienzo de cualquier tema. No se trata de ofrecer un curso de historia paralelo, sino de ubicar cultural y científicamente al alumno en cinco minutos, haciendo notar aquellos casos en que es evidente la analogía filogenia-ontogenia del conocimiento. El balance actual se inclina por este enfoque dado el matiz cultural que confiere al curso de que se trate, y el engarce que representa con aspectos sociológicos específicos como los de Química Ambiental.

Mencionamos sólo en función de excentricidad un curso de dudas y pa-

radojas sobre la base de: "Problemas todavía no resueltos de la Química" y "Preguntas Fermi", como sacudimiento intelectual saludable en los últimos tramos de una carrera. Pero cuidémosnos de ignorar demasiado y transmitir así a nuestros alumnos y congéneres humanos una sensación de inseguridad emocional y de incertidumbre intelectual, las cuales alimentan el vacío existencial de seres humanos que han perdido el hábito de la lectura y del estudio, además de las carencias en su vida interior.

### **2.9. Integral Unificado**

La combinación parcial o total de los enfoques descriptos puede ser utilizada para un curso completo, pero la integración de contenidos se logra de manera natural por medio de **temas unificantes y tratamiento unificados**, estructurales y dinámicos, respectivamente.

#### **2.9.1.Temas**

- a) Partículas químicas: átomos, moléculas, radicales libres, asociaciones iónicas
- b) Uniones químicas: iónica, covalente, metálica (intra e interpartículas)
- c) Geometría química: cristales, moléculas, complejos; ángulos de unión, pares aislados; simetría.
- d) Clasificación Periódica: estudio de elementos y sus compuestos
- e) Compuestos orgánicos: clave Rr Uu Ff (R Radicales, unidos por U Uniones a F Funciones)

#### **2.9.2.Tratamientos (paralelismos)**

- a) Estequiometría-Energética: conservación, espontaneidad, cinética
- b) Reacciones iónicas en solución: Dador  $\rightleftharpoons$  Aceptor + Partícula ( $H^+$ ,  $M^{n+}$ ,  $X^{n-}$ ,  $e^-$ )
- c) Caminos de reacción (mecanismos): intermediarios covalentes y iónicos.
- d) Ecuaciones símil-Arrhenius: colisiones interpartículas
- e) Coordenada de reacción: diagramas "arbólito", catálisis; termo - y foto - reacciones

Ya hemos mencionado la unificación metodológica, que aparece de manera manifiesta en los métodos instrumentales y en la Química Ambiental.

Un docente inspirado puede seleccionar un grupo de temas y tratamientos, sea de nuestra lista o de su creatividad, para construir un programa de estudio compacto por unificación. Este enfoque es particularmente recomendable al final de una carrera universitaria, aunque como tendencia puede ser incorporado en cualquier curso desde el nivel medio en adelante.

### 3. Comentario final

Vemos así que con instrumentos intelectuales corrientes se puede responder a complejos problemas y desafíos en el estudio y enseñanza de la Ciencia. Este desarrollo ofrece una amplia opción entre enfoques y abre atajos para entender los significados de la Química.

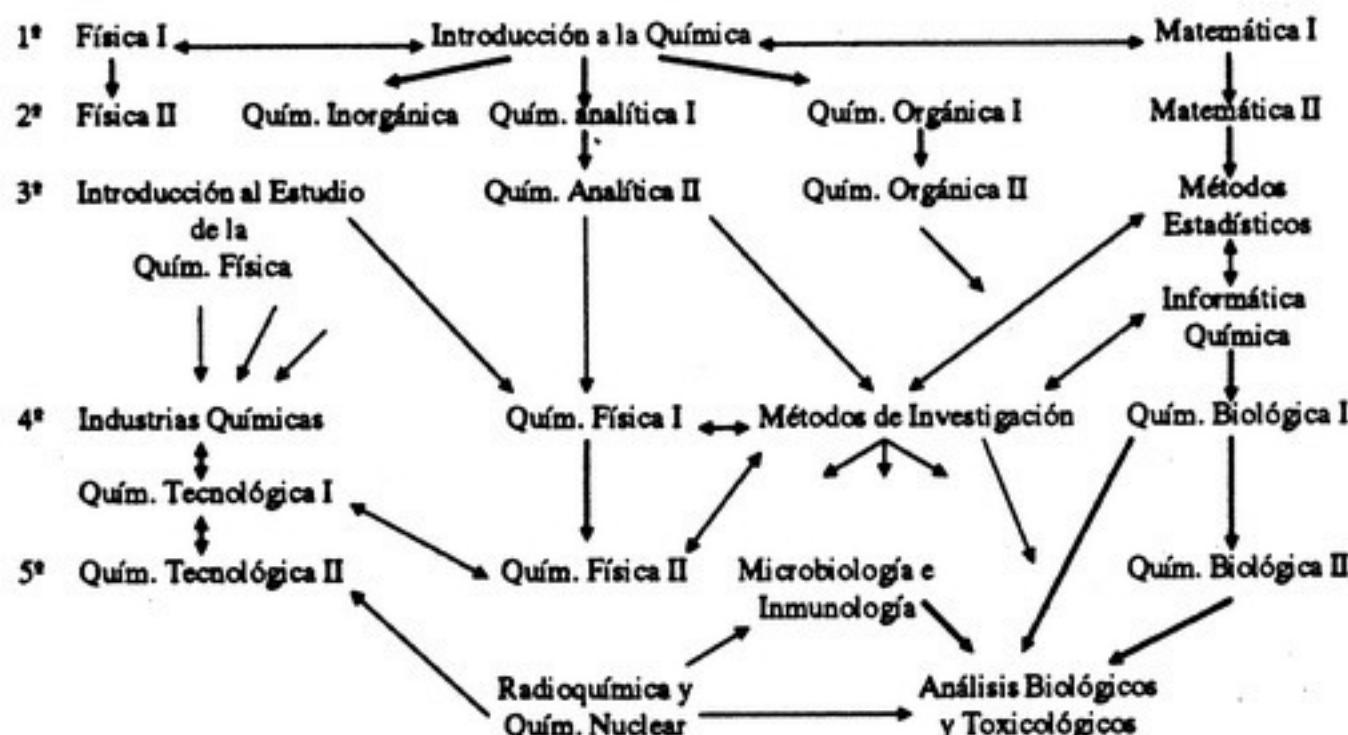
Ciertamente, algunas ramas nuevas de la Química, como la Biotecnológica, y la Química de los Materiales, permiten vislumbrar nuevos enfoques que van apuntando hacia las otras ramas por vías diversas, cuyo desenlace merece todavía un tiempo de espera.

A nuestros colegas, quienes, como nosotros, gozan de la "adicción educativa" y se sienten momentáneamente desilusionados por algunas circunstancias y por ciertas conductas humanas, les expresamos con toda simpatía un mensaje de optimismo alimentados por las tres virtudes de la docencia: fe, esperanza y calidad.

### Apéndice A

#### Esquema de asignaturas químicas

##### Año

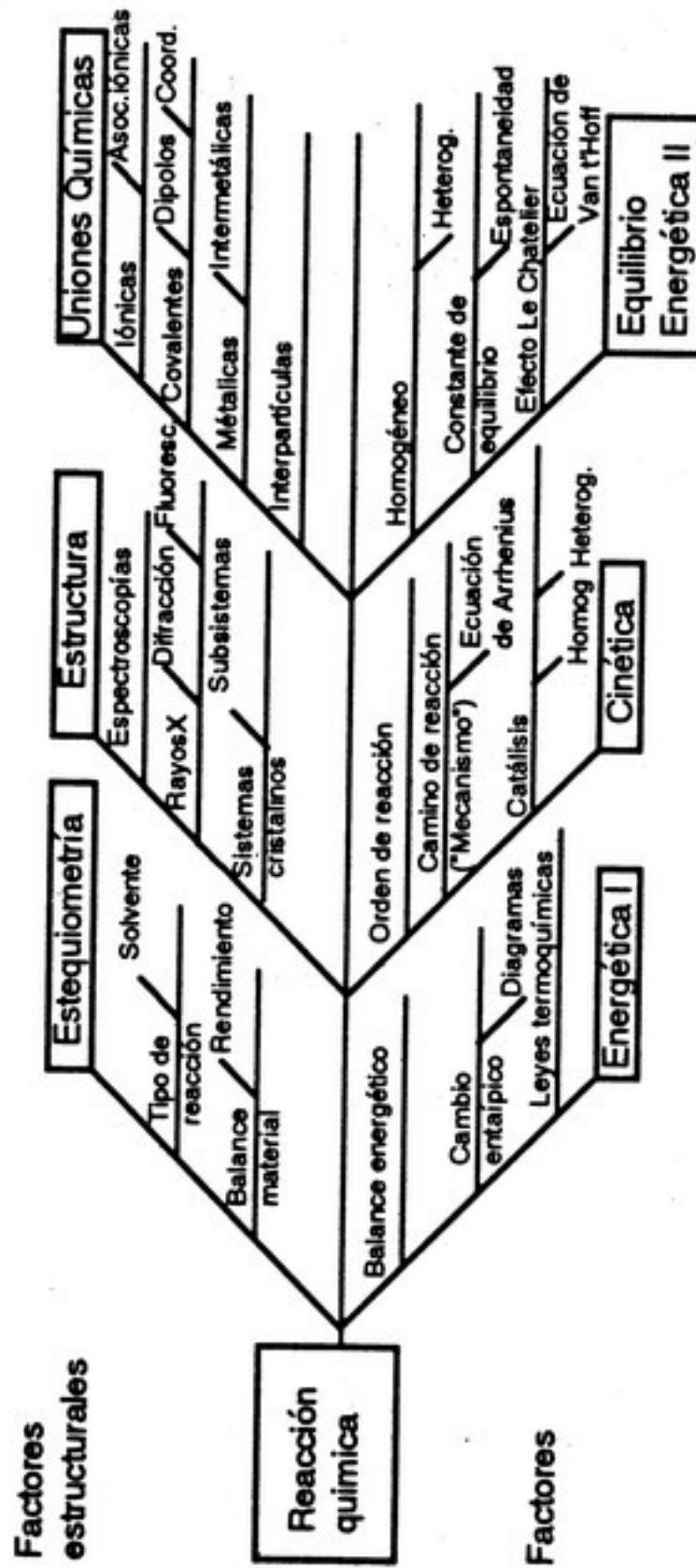


**Asignaturas integrales:** Historia de la Cultura I y II, Filosofía I, II y III, Teología I, II y III, Ética Profesional

**Asignaturas de Curso de Ingreso:** Química y Física (evaluativas), Matemática y Metodología (conceptuales)

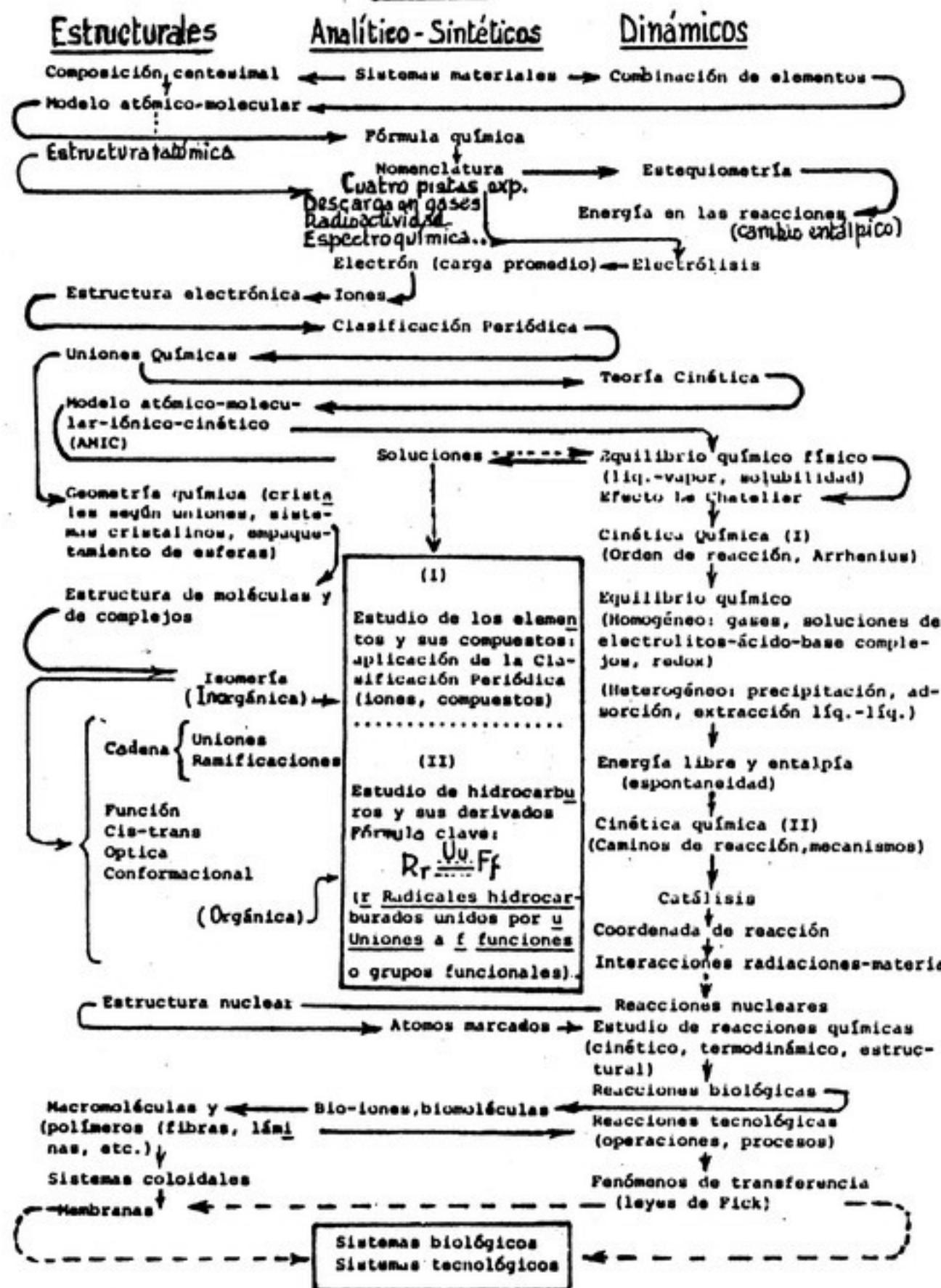
**APENDICE B****Diagrama de Ishikawa para conceptos fundamentales de Química**

**Diagramación de Ishikawa para conceptos fundamentales de Química**



## APENDICE C

## Diseño de un programa de Química Básica

TEMAS

## BIBLIOGRAFIA

- (1) GUERRERO, A.H. Tendencias actuales en Química Analítica Ciencia e Investigación: 1957, 7: 327.
- (2) EYRING, H.; WALTER y KIMBALL, O. Quantum Chemistry. Ed. Wiley (1971)
- (3) KIMBALL, G. Applications of wave mechanics to chemistry. Conferencia en Reed College, Portland, Oregon (1959).
- (4) LANDÉ, A. Nuevos fundamentos de la Mecánica Quántica, Ed. Tecnos (1968).
- (5) VON BERTALANFFY, L. General System Theory, Ed. George Bragilier (1968). El libro fundamental "Theoretische Biologie" apareció en 1932 pero "Das Weltbild der Biologie" debió esperar hasta 1948.
- (6) WIENER, N. Cibernetica y Sociedad, Ed. Sudamericana (1958).
- (7) GUERRERO, A.H. Cibernetica Química, Ciencia e Investigación: 1965, 21, 3.