

Multiplicidad funcional de la representación molecular: Implicaciones en la enseñanza y aprendizaje de la Química

María Victoria Alzate Cano

Vicky@matematicas.udea.edu.co

Concesa Caballero

concesa@ubu.es

Marco Antonio Moreira

moreira@if.ufrgs.br

“Se razona sobre una sustancia química desde que se ha establecido su fórmula desarrollada. Se ve, pues, que a una sustancia química se asocia en adelante un verdadero nómeno. Dicho nómeno es complejo y reúne muchas funciones...”

Bachelard

[1993(1940),51]

Abstract

This text has the sense of a thoughtful about some epistemology aspect the representation functional multiplicity of molecular, with the propose to give an opportunity of educational investigation in chemistry in the first levels of professionals studies. Because of the molecular structure concept is assumed in chemistry teaching in simple way, as the corresponding different representations are reduced to gross static models, adopted in a thoughtless way as ingenuous pictographic signs, in order to be repeat from the text or from the professor's writing to the students' writing without comprehension of the symbols. The teaching and learning of chemistry is too far a way from conceptual progress; plurality and functionality of the meanings of substances representations and its physic-chemical modifications assumed as dynamics objects and trajectories. This concept that in the chemical knowledge includes empirical, theoretical, physical, mathematical and epistemological aspects, is complex and it is necessary to approach it in its complexity. An epistemology perspective of how chemists have created a great amount of representations, meanings and theories for this concept when they solve situations and exercise comprehension, explanation and prediction, acquire a great value for teaching and learning chemistry in a classroom. The practice of epistemological perspective will be to promote approximations to plurifunctional thinking about the molecular structure, well supported in educational research in the field of mental representations, in

particular the related studies with mental models and conceptual fields that stimulate the research for psychological process to learn concepts and models in physics and mathematics when students resolve classes of situations.

Keywords: Molecular structure; chemistry teaching; mental representations, knowledge-in-action; conceptual fields

Resumen

Este texto tiene el interés de una reflexión acerca de algunos aspectos epistemológicos relacionados con la multiplicidad funcional de la representación molecular, con el propósito de plantear una posible perspectiva de investigación educativa en Química en primeros niveles universitarios. Dado que el concepto de estructura molecular es asumido por la enseñanza de la química de un modo simplista y las diferentes representaciones que le corresponden son reducidas a burdos modelos estáticos, adoptados de modo irreflexivo como ingenuos signos pictográficos para ser repetidos desde algún texto o de la escritura del profesor; los estudiantes escriben sin la comprensión de los símbolos. La enseñanza y el aprendizaje dista bastante del progreso conceptual, la pluralidad y funcionalidad de significados de las representaciones de las sustancias y sus modificaciones químico-físicas asumidas como objetos y trayectorias dinámicas. Este concepto con contenido químico: empírico y teórico, matemático, físico y epistemológico, es complejo y necesario de abordar en su complejidad. Una perspectiva epistemológica de cómo los químicos han creado una gran cantidad de representaciones, significados y teorías para este concepto cuando resuelven situaciones y ejercen la comprensión, la explicación y la predicción, adquiere un importante valor para la enseñanza y el aprendizaje de la química en el aula de clase. La práctica de esta perspectiva epistemológica podría promover en el aula aproximaciones al pensamiento plurifuncional acerca de la estructura molecular, cuando es fundamentada en la investigación educativa en el campo de las representaciones mentales, en particular, los estudios relacionados con modelos mentales y campos conceptuales que propugnan la indagación de los procesos psicológicos de aprendizaje de conceptos y modelos en física y matemáticas cuando los estudiantes resuelven clases de situaciones.

Palabras clave: Estructura molecular; enseñanza de la química; representaciones mentales; conocimiento-en-acción; campos conceptuales.

1. Introducción

La noción de estructura molecular es un concepto central de la química, implicado en el desarrollo de la ciencia contemporánea y de algunas áreas en particular, como la biología y la genética molecular, la electrónica y la ciencia de materiales. Es una poderosa herramienta conceptual para racionalizar una enorme cantidad

de fenómenos químicos y físicos conocidos y para predecir el desenlace de interacciones químicas aún no percibidas. El progreso actual y futuro de la química parece depender, en parte, de la habilidad de los químicos para utilizar el concepto de estructura molecular en la más amplia variedad de situaciones creativas de naturaleza fisico-química.

Dada la importancia de este concepto para el pensamiento químico moderno, en particular, para la enseñanza y el aprendizaje de la química en el nivel de la educación superior, es de vital consideración la preocupación por la clase de representaciones mentales adquiridas, modificación y construcción de nuevas representaciones y las formas de razonamiento de los estudiantes, cuando interactúan con situaciones químicas en la perspectiva de un aprendizaje significativo de conocimiento químico. Al respecto, la reflexión epistemológica acerca del estatus y progreso científico de la noción estructura molecular, los textos de química y las actividades de aula y extra-aula, tienen un rol central para la significación y comprensión progresiva de dicho concepto.

Este concepto está vinculado de modo principal, en varios textos de química básica, al concepto de geometría molecular para moléculas con enlace covalente, por ejemplo: Chang (2003) y Brown-Lemay-Bursten (1991); en títulos independientes incluyen al enlace metálico, iónico y coordinado y las respectivas representaciones en términos de geometría molecular. Otros textos, como es el caso Manku (1990), Mó Yañez (2000), lo vinculan a los conceptos enlace covalente, iónico y coordinado y subyace de modo explícito la geometría molecular; Casabó i Gispert (1996), además de las clases de enlace citadas incluye el enlace metálico.

La representación geométrica, con el auge del computador, recorre las páginas de los textos y una serie de imágenes alusivas a diferentes formas, polígonos y poliedros, se asocian a la representación molecular. Estas representaciones son designadas comúnmente con el nombre de modelos moleculares o modelos metafóricos, clasificados como: conectivas, esferas y conectivas, esferas tangentes y superficies de potencial. Estos pictogramas en los capítulos respectivos, sin embargo están asociados al modelo mecano-cuántico y/o a la teoría de la repulsión electrónica, a la teoría de sólidos iónicos o a la de los metales entre otras, y utilizados para la explicación de una serie de situaciones químicas y físicas acerca de las sustancias; la enseñanza los corresponde con una representación gráfica estática, que trata a núcleos y electrones como objetos clásicos, mezcla ideas clásicas precuánticas y cuánticas, para generar, como parece ser, un caos conceptual. Éste modelo, muy generalizado entre profesores y alumnos, dotado de gran poder heurístico y lleno de problemas conceptuales y empíricos no permite una comprensión adecuada de la química contemporánea (Villaveces, 2001:112). Esta cuestión es un problema pedagógico del cual no se han ocupado los docentes de química ni desde lo conceptual ni desde lo epistemológico.

También estos textos, como todos los textos de Química y los artículos científicos, presentan una amplia y diversa serie de representaciones gráficas relativas a la estructura molecular, no propiamente geometría molecular, aún cuando son representaciones de naturaleza pictográfica en dos (2D) y tres (3D) dimensiones, denominadas desde la Química Clásica fórmulas estructurales y en términos más simples, símbolos químicos y lenguaje químico o semiótica química. Estas representaciones que usualmente no se presentan acompañadas por ningún título en particular, ni fundamentadas en teoría química alguna, ni destacadas como importantes modelos conceptuales, y en general, de modo inadecuado, presentadas en calidad de equivalencia con la representación geométrica, son sin embargo núcleo central de la teoría química, creadas en el desarrollo de la sistematización del conocimiento químico a partir de mediados del siglo XIX como representaciones para dar cuenta de los sucesos químicos.

Las fórmulas estructurales han progresado a la luz del homeomorfismo e isomorfismo de la representación molecular, contribuyendo a la creación y crecimiento de la topología química, con un rol fundamental en los procesos de síntesis química para el desarrollo de estrategias vinculadas a la isomería, la estereoquímica y a la identificación de la disociación de uno o más enlaces, de correlaciones de enlaces, grupos funcionales y transformación de reagrupamientos.

Dos designaciones de aparente similaridad, nombradas ambas representación molecular, por un lado fórmulas químicas, composición y estructurales, por otro, moléculas representadas como geometría molecular a las cuales se asignan características de longitud, energía y ángulo de enlace, conectadas en su origen conceptual, fundamentadas en diversas teorías, ambas símbolos pictográficos con roles diferentes en contextos diversos y complementarias para muchos casos, en su conjunto constituyen una pluralidad de representaciones, un conjunto de modelos adecuados que adquieren especificidad funcional en contexto, pertinentes para unos propósitos pero no para otros.

La enseñanza y aprendizaje de la química, parece ser, poco ha reflexionado, desde lo epistemológico y lo conceptual, acerca del progreso y diferenciación ascendente de la pluralidad y funcionalidad de la representación molecular, presenta una idea parcial de ésta, limitada en lo fundamental a los modelos geométricos como entidades individuales y estáticas, válidas para cualquier situación independiente del contexto, en contracorriente del conocimiento moderno. Los alumnos, parece ser, no incorporan a su estructura cognitiva de modo significativo la representación molecular, el sistema simbólico y los diversos subsistemas semióticos asociados a las clases de sustancias químicas (Alzate y otros, 2001; Alzate, 2006), en calidad de sustitutos representacionales de gran poder heurístico, los cuales implican la comprensión de un conjunto de significados conectados como redes de conocimiento acerca de las propiedades químicas y físicas de las sustancias y por tanto, ejercen un razonamiento débil en relación con los objetos ontológicos de la química y sus representaciones.

La enseñanza situada en el realismo ingenuo, destaca algunas cualidades de percepción directa de las sustancias y obvia las fórmulas químicas; posiblemente éstas son abandonadas a símbolos estáticos no diferenciados y copiados de modo mecánico como simples signos a los cuales se atribuye, según el caso, un significado inadecuado por algunos alumnos, mientras una mayoría carece de algún significado, más allá de la identificación de los respectivos signos en el lenguaje natural. Las fórmulas químicas no son ejercidas como instrumentos de racionalidad acerca de las sustancias puras y sus modificaciones químico- físicas, parece ser no son consideradas como un poderoso sistema conceptual al cual corresponden múltiples representaciones y una pluralidad de teorías y significados.

La investigación sobre este problema posiblemente se corresponde con la indagación de alternativas para un aprendizaje significativo (Ausubel, 2002; Moreira, 2000a; Novak y Gowin, 1988) del conocimiento químico, con miras a estudiar la clase de representaciones mentales que construyen los alumnos y a realizar un esfuerzo orientado por la reflexión epistemológica como el ámbito para la búsqueda de una argumentación que permita trascender la filosofía del sustancialismo y subsumirla en una filosofía racional, con el fin de guiar la percepción de los objetos ontológicos de la Química y su fenomenología en la perspectiva de orientar la construcción progresiva de las representaciones mentales útiles para la comprensión, la explicación y la inferencia.

El rol fundamental de la representación en química, la diversidad de clases de ésta, la importancia de su reflexión con respecto a la enseñanza de la Química, la diferenciación entre los dos constructos mencionados con anterioridad, los dominios del campo de investigación en Química, sus metodologías y redes conceptuales, el lenguaje en el cual sus conceptos y representaciones son expresados y las continuas interacciones a la luz de las cuales estos han evolucionado, así como algunos análisis respecto a las posiciones de reducir los conceptos y principios de la Química a la Física son expresados por diversos autores como Bachelard [1993(1940), 1973(1971)], Bhushan y Rosenfeld (1995, 2000), Hoffman y Lazlo (1991), Jensen (1998a, 1998b, 1998c), Prelat (1960), Scerri (2000), Schummer (1998), Weininger (1984), Turro (1986), Wolley (1978).

Dado que la enseñanza, a nuestro modo de ver, pone demasiado énfasis en algunas cualidades sensoriales y en trayectorias mecánicas y descuida el nivel representacional, es viable a la luz del progreso epistemológico del conocimiento químico, plantear opciones para una apertura a la estructuración gradual de niveles de enseñanza de una Química con mayor énfasis en lo conceptual, en la cognición de los alumnos y los grados de crecimiento de la complejidad vinculada a situaciones químicas, con miras a contribuir a la superación de las “naciones-obstáculo” (Bachelard, 1973:72) generadas en los docentes y en los alumnos y que impiden aprender de modo significativo la representación en Química abierta a la pluralidad de interpretaciones.

2. La Química es racional

2.1 Las sustancias tienen sustitutos racionales

En 1940, es publicada en francés, la primera edición de la obra de G. Bachelard titulada "La Filosofía del No". Esta "Filosofía del No" tiene entre otros, el título "El no sustancialismo. Los pródromos de una química no lavoisieriana". En este capítulo, Bachelard significa las fases del progreso científico de la química. Plantea el perfil epistemológico de la noción de sustancia, estructurado en tres regiones denominadas realismo o sustancialismo, racionalismo y superracionalismo. Este perfil progresa de la descripción de las sustancias como entes estáticos de cualidades perceptibles de modo directo y concebidas sus transformaciones como trayectorias mecánicas, a concebir la categoría de sustancia como dialectizada y normalizada.

La ordenación del pluralismo disperso, propio del realismo, crea un pluralismo coherente que permite pensar la sustancia como una pluralidad de estados, como una familia de casos regida por reglas metodológicas en la pluralidad de la identidad, en las operaciones de purificación y en las transformaciones químicas; una concepción operatoria del concepto de sustancia es establecida. Las sustancias son estudiadas en evolución, poseen cualidades sustanciales determinadas en contextos y operaciones diversas en el espacio y el tiempo. Paralela a los estudios de evolución de las sustancias progresa la representación en química, las fórmulas químicas, en particular las fórmulas desarrolladas o fórmulas estructurales, como un intermediario que determina las relaciones entre el fenómeno químico pensado y el fenómeno químico real.

En una racionalidad cada vez más abstracta centrada en la apertura de los marcos del racionalismo, en una línea cercana a los elementos químicos, la categoría de sustancia es ramificada y diversificada y establecida en el nivel superracional. Una fenomenología cada vez más abstracta en el nivel de la espectroscopía de rayos-x y nuclear, permite la creación de una función matemática que implica una ampliación del plano metafórico para definir el número atómico (Z) como la característica esencial del elemento químico y crear el estatus de núcleo atómico como la sustancia básica.

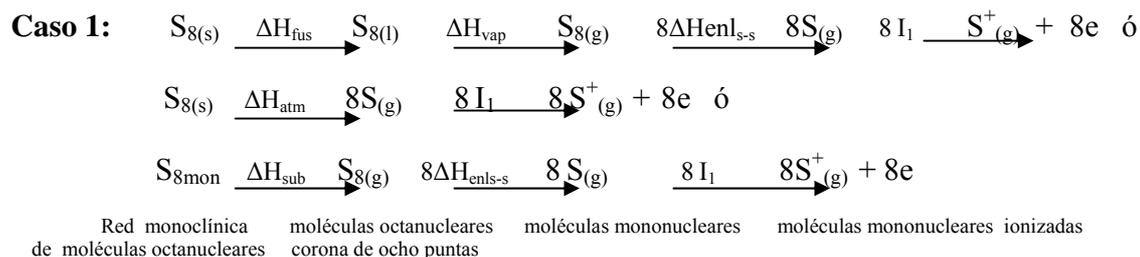
En un nivel de mayor complejidad fenomenológica donde la pluralidad de las sustancias simples y compuestas es fracturada, más allá de los límites de la sustancia pura donde las operaciones y las transformaciones en términos de la pluralidad de la sustancia no tienen significado, la dialéctica de la cualidad química y física origina la apertura de la categoría sustancia básica. Bajo la cualidad química, la cualidad física se manifiesta para crear la categoría de sustancia básica como equivalencia del concepto elemento químico significado con el núcleo atómico, mediante la relación lineal establecida en los espectros atómicos de rayos-x entre el número de onda de la línea espectral (ν_k) y el número atómico (Z).

$$\nu_k = (1/\lambda)_k = 3/4R(Z-\sigma)^2 \sqrt{\nu_k/R} \propto Z \quad R \text{ constante de Rydberg} \quad \sigma = 1$$

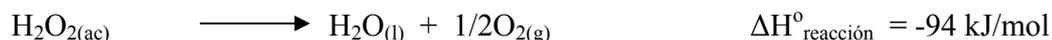
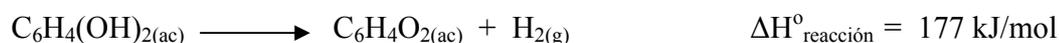
El plano de lo superracional avanza después de haber encontrado núcleos y electrones como constituyentes de las moléculas para definir éstas como campos de fuerza estructurados como estados de energía cuantizados. Esta idea ha implicado concebir el mundo microscópico como conjuntos de individualidades interactuantes, primero independientes y luego dependientes del tiempo descritos en términos de probabilidades. Una función electrónica matemática se extiende en algunos casos como una forma ondulatoria y en otros como una forma corpuscular para dar sentido a la raíz profunda de los fenómenos.

Es nuestro interés centrar la atención en la región de lo racional estructurada en torno a las nociones “dinamización de la sustancia química” y “sustituto racional” de las sustancias, las fórmulas químicas desarrolladas o estructurales como representaciones de las sustancias en contexto. Con una postura epistemológica, el materialismo racional, para argumentar la superación de la descripción sustancialista centrada en la cualidades de primer nivel, perceptibles de modo inmediato, y el concepto “trayectoria mecánica” para referirse a las modificaciones químicas de las sustancias, Bachelard alude a una organización más general del conocimiento químico, la cual abarca teorías más generales que unifican dos cuestiones centrales. En primera instancia, una paridad entre los conceptos sustancia y energía; en segundo lugar, la noción de “trayectoria química” considerada por Bachelard para trascender de las trayectorias mecánicas individuales de las reacciones químicas, a familias de trayectorias químicas en los procesos de síntesis química con el fin de percibir de modo claro la evolución de una sustancia en una dada operación química.

El carácter correlativo de los conceptos sustancia–energía, supera la supremacía asignada en la química lavoisieriana al concepto de sustancia, a la cual se atribuyen cualidades transitorias en términos de contiene energía y los cambios energéticos son expresados en términos de resultado final para afirmar la naturaleza exotérmica o endotérmica de una reacción. Sustancia y energía dibujan un devenir, los intercambios energéticos determinan modificaciones de las sustancias y las modificaciones materiales condicionan intercambios energéticos. La energía es parte integral de la sustancia, ésta es inseparable de su energía. Bachelard (ibid: 58) piensa a la sustancia como un sistema multiresonante que puede absorber y emitir cierta clase de radiación, y de este modo la transformación de la sustancia en diferentes especies químicas a lo largo de una trayectoria constituye un grupo de resonancias, un grupo de categorías para afrontar la complejidad del fenómeno químico. Los casos 1 y 2 representan situaciones de trayectorias dinámicas de modificaciones químicas; para el primer caso, tercera opción, se detallan los cambios de la representación molecular.



Esta reacción es representada mediante el siguiente mecanismo o secuencia de reacciones intermedias para efecto de percibir el dinamismo de la modificación química:



La fenomenología particular de la química lavoisieriana es subsumida por una fenomenología más global, conectada a una racionalidad que guía a priori la sustancia química y sus comportamientos. El estudio de las fases intermedias en las reacciones químicas y de los mecanismos de activación permite superar la enumeración de hechos y el concebir la reacción química como un problema de entrada [reactivos (datos)] y salida [productos (resultado)] para ocuparse de la actividad de las sustancias como una continuidad de mecanismos intermedios para percibir la dinámica química de las sustancias, descrita ésta, como trayectorias normalizadas para percibir desde la racionalidad, el devenir de la sustancia integrada a los cambios energéticos. La modificación química es representada como una trayectoria que da lugar a visualizar estados sustanciales de la sustancia química, los cuales son concomitantes con cambios energéticos, sustancia y energía son algo así como las dos caras de una moneda.

Las sustancias y sus trayectorias químicas se desenvuelven en el plano operatorio de un modo normalizado, el cual es reproducible en función de un método de producción en un contexto específico. Paralela a esta normatividad y en una dialéctica de lo racional y lo real, progresa la representación en química expresada en diversos sistemas simbólicos, las fórmulas químicas, las cuales actúan como un intermediario para establecer las relaciones entre el mundo de lo racional y el mundo de la fenomenología. El plano de la representación se proyecta integrado a la dinamización de la sustancia. La representación se establece como un ente racional supremo sobre el mundo de lo real. Las sustancias y las familias de trayectorias químicas son pensadas y configuradas en

un espacio metafórico. Las sustancias tienen un sustituto racional, las fórmulas químicas desarrolladas o estructurales (Bachelard, *ibid*:51).

El tránsito de la sustancia a un sustituto racional progresa de las fórmulas químicas de composición, empíricas y moleculares, a fórmulas desarrolladas como verdaderas organizaciones estructurales de naturaleza pictográfica que permiten razonar, inferir y predecir acerca de la fenomenología química. Las fórmulas químicas progresan con la experiencia química racionalizada y se constituyen en una normativa que anticipa posibilidad de desarrollo de las experiencias químicas y, a la vez, plantea las limitaciones para realizarlas en términos de los reagrupamientos y configuraciones de las funciones químicas. Con palabras de Bachelard (*Ibid*:51) “*Se razona sobre una sustancia química desde que se ha establecido su fórmula desarrollada...*”, fórmula estructural conceptualizada como un “...*noúmeno complejo*” que “*reúne muchas funciones*”, es decir, la sustancia en su diversidad de comportamientos es conocida por la razón y anticipada por la razón para guiar la acción química. Pluralidad y funcionalidad de la representación se corresponde de un modo integral con la multiplicidad de la sustancia y sus trayectorias químicas dinámicas en los procesos operatorios de purificación y de síntesis química.

El noúmeno químico está en íntima conexión con el fenómeno, desde la caracterización de la sustancia por su identidad química, fórmula de composición empírica y molecular, y la pluralidad adquirida con la multiplicidad de las sustancias en diferentes contextos y su estructura acorde con las modificaciones químicas en ambientes artificiales definidos de modo explícito. El noúmeno se diversifica y progresa en racionalidad integrado a las limitaciones de las experiencias químicas en contexto y a varias teorías que hacen del espacio metafórico un verdadero modelo. La figura (1) representa varias opciones moleculares para la sustancia agua H₂O (Óxido de dihidrógeno), las cuales expresan una idea de la multiplicidad simbólica y funcional.

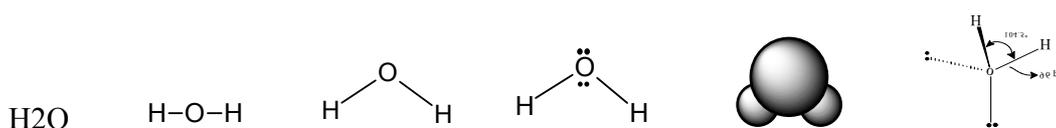


Figura 1

En su obra “Epistemología” Bachelard (1973:106) se refiere a las fórmulas químicas desarrolladas como “*verdaderas misceláneas de teorías*” que determinan una <<*miscelánea de símbolos*>>. Para cada símbolo químico en una representación 2D y/o 3D subyacen teorías, de tal modo, que la fórmula desarrollada es un modelo con un aspecto metafórico y un menor o mayor grado de significatividad dependiendo de la red conceptual del sujeto perceptor. El simbolismo químico ha progresado a la luz del desarrollo del pensamiento moderno. La fórmula estructural adquiere una función dual, por un lado crea un

cuadro de información química de la sustancia en contexto y por otro, ofrece posibilidades para dilucidar la esencia del fenómeno químico y desarrollar la inferencia y la predicción. La figura (2) representa pluralidad de la molécula de metano CH_4 (Tetrahidruro de carbono), la cual representa la sustancia en fase gaseosa.

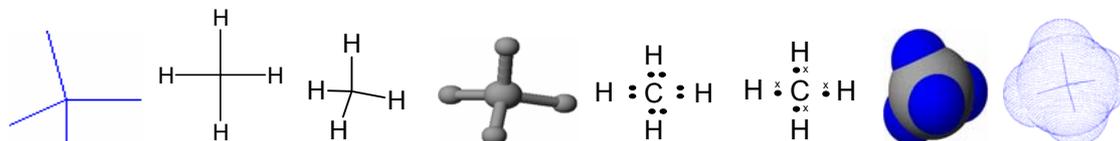


Figura 2

Un nómeno o fórmula estructural representada 2D y/o 3D es un objeto conceptual que en primer nivel suministra información relacionada con el número y clase de elementos, la valencia de los elementos, las posibles organizaciones espaciales de los enlaces químicos en una dada combinación química y las posiciones de los grupos funcionales según la complejidad de la fórmula. Ésta sufre transformaciones sucesivas en contexto según la dinámica química de la sustancia. Adquiere además, integrada a la anterior información, múltiples significaciones de acuerdo a las teorías referenciadas para la interpretación del fenómeno químico y del enlace químico.

2.2 Progreso de la representación y pluralidad de significados

Los niveles de racionalidad y superracionalidad enunciados por Bachelard, son reconocidos como la forma de razonar en química y presentados de un modo afín, por algunos químicos, preocupados por el estudio de la representación en química y la necesidad de diferenciar niveles de la misma, en particular para consideraciones pedagógicas.

El dinamismo y funcionalidad de la representación molecular es planteado por Hoffman y Lazlo (1991:4) en términos del grado ascendente de la complejidad molecular, modelos útiles para unas situaciones y para otras no; lo reconocen como una transformación simbólica de la realidad, de carácter gráfico y lingüístico, histórico, artístico y científico. Un primer nivel polifuncional, referido a la estructura molecular como grafos 2D y 3D, en términos de elementos y valencia como fue anotado en la página anterior. Un segundo, vinculado a la representación como geometría molecular, ángulos y longitudes de enlace son definidos para crear una unidad rígida, cuyos detalles son determinados de modo principal, a la luz de las técnicas de difracción de rayos-x. Un tercer nivel, centrado en los métodos ab-initio de la química cuántica, núcleos (fijos) y electrones en movimiento interactúan, en la idea según la cual la raíz química está en los electrones, densidades electrónicas de probabilidad y superficies de energía potencial constituyen otra clase de la representación molecular.

En una dirección similar, Schummer (1998) reconoce como núcleo químico de la química a las sustancias y a las fórmulas estructurales, para diferenciar la estructura conceptual básica de la química de otras estructuras conceptuales que actúan en los niveles físico-químico y químico-biológico. “*Trabajando con sustancias y pensando con fórmulas estructurales*” es la idea relevante planteada por este autor para referirse a las fórmulas estructurales (grafos moleculares), como representaciones químicas apropiadas para realizar la actividad mental inferencial acerca de las propiedades químicas de las sustancias.

En la dinámica de la definición operatoria de sustancia pura y de las modificaciones químicas, este químico diferencia dos niveles de la representación molecular, concebidos ambos como representaciones con un aspecto metafórico o pictográfico, a los cuales subyacen fuertes sistemas teóricos para interpretar, explicar y predecir sobre los comportamientos de las sustancias en contexto. Un primero, concebido como fórmulas estructurales en las cuales se identifican elementos y grupos funcionales, y la conectividad entre estos, representaciones formalizadas en 2D y 3D. Esta clase representa sustancias en ciertas relaciones químicas, una con respecto a otras en una red química a la cual subyace un conjunto de reglas como redes de conocimiento químico acerca del grupo de sustancias. De este modo, las fórmulas estructurales son una primera aproximación molecular, dinámica y funcional, que representa de modo sistemático relaciones químicas en una red de clase de sustancias o de clases de sustancias. La figura (4) representa algunas fórmulas estructurales para la clase alcoholes hidrocarburoados.

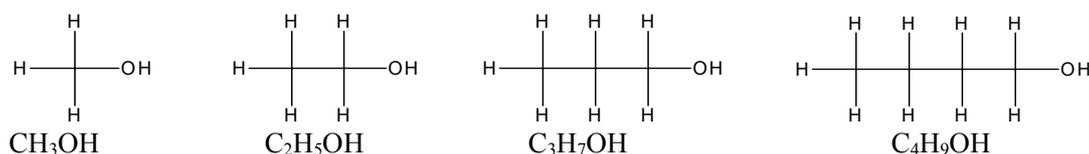


Figura 4

El progreso de la representación molecular en términos de fórmulas estructurales ha crecido a la luz de la lógica de las identidades y diferencias de las partes estructurales de las fórmulas desarrolladas, como representaciones de la identidad y la diferencia química entre dos o más sustancias, apoyada en la topología química y la teoría de grupos. Ha creado conjuntos de reglas para comprender, interpretar y transformar fórmulas estructurales, lo cual ha producido un poderoso instrumento de sistematización y capacidad predictiva (Ibid:21). En esta perspectiva la fórmula estructural es denominada grafo topológico y le subyace una teoría según la clase o clases de grupos funcionales en la organización estructural. En esta perspectiva, las fórmulas estructurales son la representación adecuada para realizar predicciones acerca de las propiedades químicas, es la manera como hasta el presente se han derivado de modo sistemático las transformaciones químicas. También, las fórmulas estructurales han tenido un rol

muy importante en la orientación de la clasificación empírica de las sustancias, en la corrección y el refinamiento de los diferentes sistemas clasificatorios.

Schummer reconoce de modo esquemático las siguientes etapas para la generación de las reglas que subyacen a las fórmulas estructurales y aclara que su origen e interpretación es mucho más complejo:

- Las representaciones pictográficas son construidas desde unidades básicas denominadas grupos funcionales percibidos como unidades atómicas individuales o como grupos definidos de estas unidades.
- Cada grupo funcional representa una cierta funcionalidad en la reactividad química con sustancias de diversas clases para formar sustancias de otras clases.
- Identificado el grupo funcional en la fórmula estructural responsable de la reactividad química es posible desarrollar la actividad predictiva de la sustancia correspondiente. La identificación de cuál grupo funcional representa qué clase de reactividad, su modificación o sustitución, exige el aprendizaje previo de las funciones químicas y de las relaciones de similitud y diferencia entre ellas, así como de las clases de sustancias que ellos representan.

El segundo nivel de la representación molecular anotado por Schummer, se refiere a la molécula identificada por una forma geométrica, denominada "*grafo geométrico*", generada en la organización espacial de grupos de átomos enlazados -más adecuado núcleos y electrones- a la cual se asocia las características de longitud, energía, ángulo y polaridad del enlace así como de polaridad de la molécula. Esta representación es manipulada de modo diferente a la representación como grafo topológico. Mientras esta última es flexible y se manipula en la dinámica de las transformaciones químicas, la geométrica es precisa, aislada y no flexible, proviene de los datos empíricos obtenidos en el análisis de las sustancias químicas desde las diferentes metodologías espectroscópicas, incluyendo la difracción de rayos-x y/o neutrónica y el NMR, y del vínculo de estos datos a los cálculos de la química cuántica en la metodología ab-initio.

Desde la idea según la cual, una u otra entidad molecular simple o un conjunto de entidades moleculares no es una teoría, esto es, desde la mera representación pictográfica no es posible ejercer interpretaciones y derivar inferencias, a menos que sea explicitada una referencia a una teoría, un signo, ya sea un grafo, un modelo de esferas tangentes, de esferas y conectivas o de conectivas, un conjunto de datos geométricos o una superficie de potencial, debe ser interpretado posicionado en la red conceptual de una teoría, con el fin de derivar información con relación a él (ibid:18). De este modo, el autor considera la existencia de diferentes clases de representación molecular a las cuales corresponden diversas clases de interpretación y de reglas para fines de la explicación y la inferencia de los fenómenos relacionados con las sustancias.

El autor conceptúa la representación geométrica como un resultado permitido por el conjunto de mediciones espectroscópicas que determinan las características geométricas y la conexión de la unidad estructural con los cálculos de la química cuántica. Esta clase de representación, es además, argumentada en el sistema conceptual de un conjunto de interacciones núcleos y electrones en la versión semiclásica de la mecánica cuántica, cuyas soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, proporcionan información acerca de los estados de energías electrónicas para interpretar e inferir acerca de las propiedades físicas, en particular, las electromagnéticas de las sustancias, los llamados espectros atómicos y moleculares en los diversos rangos de frecuencias del espectro electromagnético, así como de las características de paramagnetismo y diamagnetismo de las moléculas.

Wolley (1978) al referirse a los métodos convencionales de la química cuántica, fundamentados en la aproximación de Born-Oppenheimer, que separa el movimiento de núcleos y electrones y asigna a los primeros una posición fija inmodificable, los considera afincados en la poderosa necesidad de relacionar la idea clásica de estructura molecular con procedimientos cuánticos para determinar estados cuantizados de moléculas discretas, en el intento de comprender propiedades físico-químicas, en particular las cualidades espectroscópicas. Reconoce que la teoría cuántica para propiedades físico-químicas no ha sido desarrollada sin abandonar la idea de estructura molecular de la química clásica. Wolley afirma que no puede proclamarse que el concepto estructural subyacente a la explicación química sea derivable de la teoría física y explicado por la mecánica cuántica (Ibid:1074).

Los métodos ab-initio para sistemas de grandes agregados moleculares (gases clásicos, materia condensada) e interacciones débiles, para los cuales se acepta el vínculo con la noción clásica de estructura molecular, requieren ser diferenciados de los sistemas de pequeños agregados moleculares (gases diluidos, haces moleculares de baja masa molecular en espectroscopía laser). El autor llama la atención acerca de como estos dos sistemas exigen tratamientos mecánico-cuánticos diferentes y como los métodos semiclásicos para algunos experimentos físico-químicos están en desacuerdo con los requerimientos de la mecánica cuántica.

Wolley, fundamentado en los experimentos asociados a sistemas de agregados moleculares pequeños, plantea la idea de tratar estos como sistemas dinámicos de interacciones electromagnéticas desde la mecánica cuántica sin referenciar la idea de estructura molecular como lo hace la física atómica; definido, número de núcleos y electrones, por la relación de identidad química, es posible hallar solución a los estados estacionarios de la "molécula aislada" con la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Centrado en el pensamiento según el cual la estructura molecular no es una propiedad invariante ni intrínseca de las moléculas, ni derivable desde primeros principios (Ibid:1076), plantea un cambio cualitativo en

la teoría para interpretar los experimentos de alta resolución en términos consistentes con la mecánica cuántica.

Esto es, la totalidad de los observables cuánticos no está asociada de modo consistente a la noción de estructura molecular y no hay razón suficiente para asumir que las moléculas de grandes agregados moleculares deben ser pensadas como esencialmente las mismas cuando se trata de moléculas individuales "aisladas". Dos clases de sistemas, dos modos de tratamiento diferente, lo cual es razonable si hay el reconocimiento de que todo conjunto de conceptos químicos y físicos es definido con respecto a cierta clase de fenomenología, y por lo tanto hay grupos de teorías que actúan como aproximaciones para responder por clases de hechos.

En la perspectiva, no hay razones para considerar la estructura molecular como un atributo universal, el porvenir augurado por Wolley (Ibid:1078) para el concepto estructura molecular es que será menos y menos relevante para los experimentos de alta resolución de finales del siglo XX y comienzos del XXI, sin dejar de reconocer que dicha noción es un concepto sintetizante esencial para la formulación de respuestas.

De otro modo, Jensen (1998a,1998b,1998c) fundamentado en un estudio histórico y epistemológico de la química con el propósito de argumentar una estructura lógica de la química, plantea integrar tres dimensiones: composición y estructura, energía, y tiempo, como aspectos de los fenómenos químicos, y tres niveles conceptuales para el estudio de los fenómenos: Molar, molecular y eléctrico. Intenta dar una estructura lógica a la química y propone dos postulados para establecer las complejas relaciones entre el dinamismo de las sustancias (Molar) y sus representaciones como fórmulas estructurales y geométricas (Molecular), y las representaciones como interacciones entre núcleos y electrones (Eléctrico):

Propiedades molares específicas = f (Carácter molecular, concentración, temperatura)

Carácter molecular = f (Composición y estructura nuclear y eléctrica)

El primer postulado se refiere a que toda diferencia medible en una propiedad específica en un contexto definido, debe ser comprendida en una diferencia en varios aspectos de la representación molecular en términos de composición y estructura. El segundo, conecta el carácter molecular de las sustancias como una función de la composición y estructura nuclear y eléctrica.

Al relacionar de un modo bilineal dimensiones y niveles, plantea nueve categorías para clasificar conceptos y modelos de la química caracterizados en los niveles molar, molecular y eléctrico como un intento de dar forma al discurso de la química desde sus bases fundamentales y considerarlo como un aspecto pedagógico relevante para la enseñanza de la química.

Sustancias y trayectorias dinámicas, multitud de símbolos y resonancias de teorías ya sea moléculas como fórmulas estructurales, como geometrías definidas, o moléculas como núcleos y electrones, establecen una jerarquía del conocimiento químico de indudable valor para la enseñanza y el aprendizaje de la química.

2.3 Pensamiento topológico y dinamismo molecular

El concepto de flexibilidad de la estructura molecular fundamentado en el pensamiento topológico para sustentar y definir la diversidad de configuraciones de una fórmula estructural, reafirmar y potenciar los conceptos de isomorfismo y homeomorfismo de la representación, contribuir al establecimiento de sistemas de nomenclatura química y a la toma de decisiones con respecto a la estructura de modo coherente con la información química es planteado y argumentado por Turro(1986), Klein (1992), Mihalić y Trinajstić (1992), Randić (1992), Eckroth (1993), Mitchell y Chambron (1995). La idea de grafo molecular se impone como una representación de moléculas en geometría topológica.

Desde el siglo XIX, cuando se instaura en la química la teoría estructural, las moléculas se diferencian por la disposición de los elementos en una armazón de enlaces de acuerdo a la valencia, correspondiendo a cada organización un conjunto de características químicas. Por ejemplo: El etanol de fórmula química de composición C_2H_6O , al considerar las valencias de los elementos, es posible dos variantes estructurales, figura (5a, 5b):

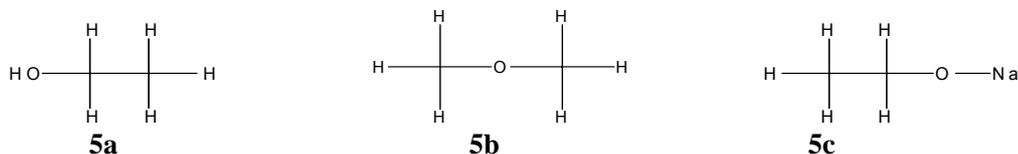


Figura 5

La investigación de las reacciones químicas del etanol indica que la estructura molecular corresponde a la citada en primer lugar. Un caso es la reacción del etanol con sodio metálico, lo cual manifiesta la sustitución de un elemento hidrógeno por un elemento sodio, estructura (5c).



Turro (1986, 891) plantea la creación por parte de los químicos de un procedimiento general con una estructuración intelectual denominada pensamiento topológico. Éste, ha progresado al desarrollar métodos de mapeo de fórmulas estructurales, con el propósito de establecer una correspondencia entre un modelo, expresado de modo topológico, y un fenómeno u observación.

Los químicos, en un compromiso profundo con las ideas topológicas, utilizan grafos para expresar la pluralidad funcional de la representación molecular y

transforman grafos moleculares en figuras geométricas, mediante pactos con la fenomenología química y física. Este procedimiento intelectual, implica contradecir y derribar ideas en la exploración de la identidad o correspondencia, evocar procesos de comprensión en la búsqueda de nuevos grafos y/o del isomorfismo y homeomorfismo de la representación. Los fenómenos impregnados con propiedades químicas, admiten ser transformados a formas matemáticas y éstas a su vez, ser mapeadas a formas geométricas topológicas.

La topología química enfatiza metodologías de mapeo flexible de las fórmulas estructurales, como grafos topológicos, con la característica de ser dinámicos y recursivos, proveer una amplia red conceptual para el seguimiento de eventos químicos con importante éxito en la química orgánica y de coordinación y permitir, la categorización y representación de un buen número de sistemas químicos con base a unas reglas mínimas y fácilmente manipulables, expuesta con anterioridad en las páginas N° 8 y 10. A diferencia del grafo molecular topológico, la forma geométrica es estática y rígida en el correspondiente espacio 1D, 2D o 3D, caracterizada por longitudes y ángulos de enlace, cualidades ausentes en el grafo topológico.

Un grafo matemático es un conjunto de puntos y de conectivas entre los puntos lo cual origina una organización estructural, ésta sufre transformaciones sin violentar las conectivas entre puntos y se genera de este modo, a través del proceso, un conjunto de estructuras idénticas y de apariencia disímil. El grafo matemático, es transformado en un objeto químico conceptual, al significar el conjunto de puntos como una colección de elementos químicos y/o funciones químicas, conectados según las reglas de valencia de cada elemento. La valencia u orden de enlace, es el concepto topológico fundamental a partir del cual se realizaron las primeras formulaciones de la teoría estructural de Butlerov en 1861, Van't Hoff. y Lebel 1874, Kekulé y Couper 1865, Werner 1891. Butlerov introdujo el término estructura química para definir una molécula compleja, a partir del conocimiento de su comportamiento químico, como determinada por la naturaleza, cantidad y estructura química de las partículas constituyentes (Kluge, Larder, 1971:290).

En topología química, un grafo molecular es un conjunto de elementos (núcleos atómicos) y/o grupos funcionales (grupos de elementos), los cuales representan los puntos y de segmentos conectivos que representan enlaces químicos; elementos y enlaces constituyen una pluralidad de estructuras moleculares topológicas. El conjunto de elementos y/o grupos funcionales representa la composición del grafo y la red de enlaces la constitución. Composición y constitución son propiedades del grafo molecular, ampliadas a dos categorías más, configuración y conformación, construidas históricamente por los químicos en el proceso de búsqueda de hacer consistente el grafo molecular con los eventos químicos (Turro,1986:890). Configuración se refiere a la constitución transformada a un espacio euclidiano 3D y conformación a la propiedad de flexibilidad del grafo molecular.

En estas cuatro características residen las bases conceptuales de los términos isomorfismo y homeomorfismo de la representación molecular, constituyéndose estos en formas de pensamiento en topología química. Dos grafos con idéntico número de puntos y conectados del mismo modo son isomorfos, esto es, dos o más grafos moleculares poseen la propiedad del isomorfismo si tienen idéntica composición y constitución, de este modo, un grafo molecular puede representar diferentes entidades moleculares. Un modelo topológicamente correcto puede ser mapeado para todos aquellos fenómenos que se corresponden con los aspectos relevantes del modelo y estos atributos cualitativos ser transferidos a un amplio número de situaciones químicas. Figuras (6) y (7) representan isomorfos de haluros de carbono y de metales del grupo 1 de la tabla periódica.

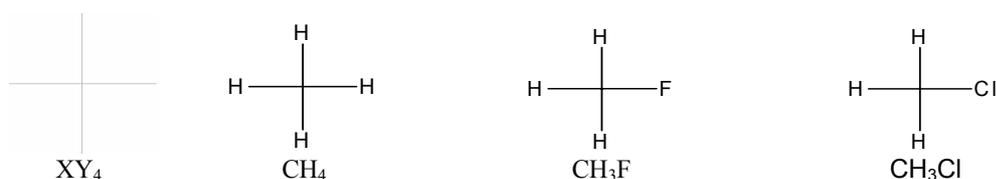


Figura 6

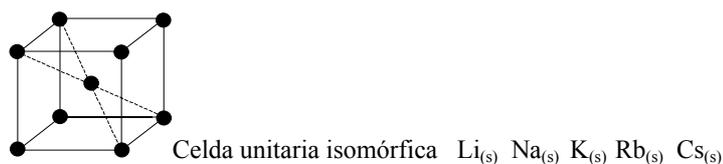


Figura 7

Una determinada composición-constitución es mapeada en la búsqueda de la correspondencia con los eventos implicados en las transformaciones químicas, esto origina una multiplicidad funcional del grafo molecular, conformación y configuración son clasificadas en la categoría de homeomorfismo de la representación. Figura (8) representa esta situación para ciclohexano C_6H_{12} .

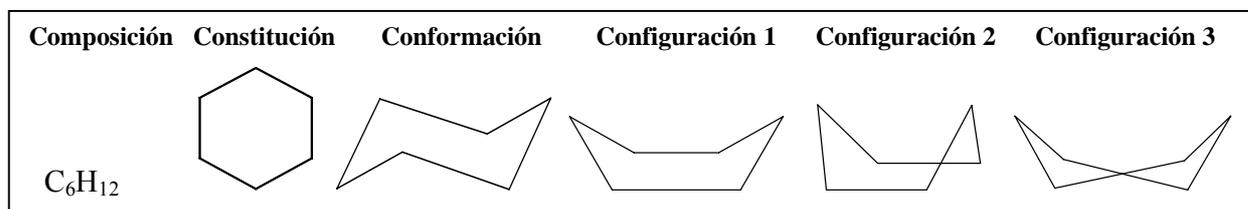


Figura 8

Este autor considera el pensamiento topológico en química, uno de los elementos importantes en el progreso del conocimiento científico, afirma ser un pensamiento cualitativo que al integrarse al pensamiento cuantitativo constituye conocimiento del objeto o fenómeno. Sugiere que el pensamiento topológico libera la intuición

de las restricciones del espacio tridimensional y es capaz de proveer una intuición más general y de mayor riqueza para el examen de los fenómenos microscópicos (Ibid:892).

El descubrimiento de la actividad óptica y por ende de la isomería óptica, definió formas geométricas fijas, creó los conceptos de isómeros ópticos, enantiómeros e isómeros cis y trans y promovió desde 1874 con Van't Hoff. y Lebel estas líneas de la representación molecular (Chamizo, 1991:19).

En resumen, el noúmeno de Bachelard, complejo y funcional, metafórico y racional, en la forma de grafo molecular se constituye en una clase de pensamiento abstracto y cualitativo para indagar la pluralidad funcional de la representación de un modo coherente con el dinamismo químico de la sustancia. Se define de modo concreto en la transformación a la forma geométrica para responder a datos cuantitativos de alguna propiedad, en particular ópticos y espectroscópicos. Progresa a la forma superracional cuando una dada configuración con cualidades definidas es trascendida a la representación en términos de núcleos y electrones, donde un alto grado de abstracción introducido por la física cuántica, abre los marcos del racionalismo de las sustancias y una nueva conceptualización en términos de funciones de onda electrónicas profundiza en la búsqueda de las raíces de las cualidades químicas y físicas. Como diría Bachelard, la dialéctica de la unidad de la sustancia estudiada bajo la cualidad química y física, lo químico estudiado bajo la cualidad física y lo físico estudiado bajo la cualidad química. Una dualidad de la organización electrónica y de la organización química, la valencia, permite que ésta sea explicada por organizaciones electrónicas y éstas tienen la función de dar razones para explicar hechos químicos.

3. Implicaciones para la enseñanza y el aprendizaje

La noción de estructura molecular como un concepto plurifuncional no uniforme a través de la Química, no independiente del problema o contexto al cual está vinculada, conectada a una multitud de teorías especificadas en términos de la situación a confrontar con las clases de representaciones moleculares, es una cuestión que invita a la reflexión de como tratar este tema en la enseñanza de la Química para un aprendizaje significativo en la perspectiva de la clase de representaciones moleculares que construyen los alumnos cuando interaccionen con clases de sustancias y de reacciones químicas y con las respectivas clases de estructuras. De este modo, adquiere un importante valor para el aprendizaje y el progresivo dominio de conocimiento químico por parte de estudiantes universitarios de segundo nivel de Programa de Química, el indagar acerca de los procesos intelectuales involucrados en la adquisición de conocimiento acerca de familias de sustancias, de reacciones químicas y de estructuras.

Esto podría contribuir en los estudiantes a forjar y afianzar a corto, mediano y largo plazo la idea de cómo la estructura molecular no es un concepto único sino

una pluralidad de significados que corresponde a tópicos tan diversos como cinética, mecanismos de reacción, síntesis y procesos de hidratación entre otras situaciones químicas.

Explorar caminos de enseñanza de la representación molecular como fórmulas estructurales en términos de grafos moleculares y sus cualidades como pensamiento cualitativo, fundamentada en los conceptos de valencia y las reglas subyacentes para establecer la conectividad entre elementos químicos y grupos funcionales, facilitando la diferenciación y la integración con la representación geométrica, parece ser un camino viable para el razonamiento analógico con un gran poder heurístico, el aprendizaje de las modificaciones estructurales y de los mecanismos intermedios que pueden ser inferidos para clases de sustancias clasificadas según clases de grupos funcionales y las redes conceptuales según los contextos.

La preocupación no solamente por una sistemática de la teoría de grafos moleculares como un conocimiento central de la teoría química, sino también por la desorientación, la confusión y el aprendizaje memorístico que hacen los alumnos de la enorme diversidad de estructuras químicas, la expresa Turro (1986), cuando se introduce en los procesos psicológicos que acompañan el aprendizaje de familias de estructuras y reacciones químicas. Los químicos, en el trabajo día a día en la resolución de problemas, ponen en marcha poderosos métodos intelectuales que involucran entre otros una aproximación topológica y geométrica para el razonamiento científico. Refiriéndose a Platt (1964) expresa el término "*fuerte inferencia*" para citar una versión del método científico que enfatiza el uso sistemático, formal y explícito de hipótesis alternativas y experimentos cruciales, lo cual puede visualizarse como un procesamiento intelectual específico que guía, diseña, ejecuta y reestructura la acción química. Especifica en esta clase el importante rol del pensamiento geométrico topológico y geométrico euclidiano, asigna a éste la metodología de "fuerte inferencia" para los procesos intelectuales en la búsqueda de soluciones a los rompecabezas químicos: la red de transformaciones químicas evidenciadas en los procesos de síntesis química para la producción de nuevas sustancias.

Compenetrado con las ideas de Piaget acerca de los esquemas para el pensamiento formal y concreto, Turro (Ibid:885) se pregunta ¿Cómo los científicos generan esquemas formales que los guían a procesos de fuerte inferencia sin hundirse en cuestiones irrelevantes? Responde que los paradigmas científicos proveen la guía. Define éstos como una constelación (un subconjunto o elemento de ésta) de creencias, conocimientos, valores, técnicas y métodos universalmente compartidos por una comunidad de practicantes. Sirven como modelos que pueden reemplazar, cambiar y modificar reglas explícitas para generar y resolver rompecabezas científicos. La mente realiza un proceso implícito de mapeo intelectual de las características del paradigma (llámense modelos, conceptos y relaciones conceptuales) sobre el rompecabezas (problema o situación) dentro del análisis según la información relevante disponible. Conocimiento químico y

conocimiento geométrico se articulan en la búsqueda de equivalencias o no equivalencias de estructuras químicas para hallar soluciones a problemas. El nómeno complejo y funcional, miscelánea de símbolos y teorías, mapea la información relevante y posibilita la generación de inferencias en la búsqueda de soluciones a situaciones químicas.

Concluye Turro (Ibid:900) sobre la posibilidad de establecer relaciones conceptuales entre geometría, intuición e imaginación para generar inferencias a la luz de las fórmulas estructurales en términos de grafos, grafos moleculares, figuras y modelos o propiamente estructuras químicas a las cuales subyace la teoría química y otras teorías o modelos según la situación. Si intuición es la comprensión instantánea de un objeto o fenómeno (pasado, presente o futuro) y la imaginación la capacidad de crear imágenes mentales sobre lo no perceptible de modo directo y establecer relaciones de semejanza, entonces, comprensión instantánea de una fórmula estructural o grupos de éstas para representar una sustancia o evento y su manipulación mental para mapear los datos, constituyen un proceso psicológico que pasa por la formación de imágenes mentales, la manipulación de grafos moleculares, que a su vez mapeados por reglas y teorías, permiten la inferencia o selección de la estructura o estructuras pertinentes a la alternatividad de soluciones de modo coherente con la información. La habilidad para alcanzar *insights* en situaciones al reconocer similitudes entre nuevos rompecabezas y rompecabezas resueltos, parece depender de la habilidad para reconocer modelos familiares y pistas claves de estos modelos en los nuevos rompecabezas (Ibid: 901).

En la mirada de este autor resolver problemas nuevos en Química no depende sólo de las características del problema, sino también del conocimiento antecedente de clases de modelos químicos y de las operaciones de pensamiento que los químicos deben realizar para establecer las relaciones pertinentes entre sus modelos y los datos empíricos. Sus modelos y procesos cognitivos se constituyen en sus representaciones mentales y manipulación de éstas acorde con su conocimiento químico, para ejercer la inferencia y lograr soluciones adecuadas a situaciones químicas. Estas ideas las consideramos como importantes referentes acerca de cómo proceden los científicos en Química, las cuales pueden contribuir a direccionar la investigación relacionada con procesos de enseñanza y aprendizaje de la Química.

De otra parte y en una perspectiva de investigación en el aula Moreira (2000b) plantea que el aprendiz percibe el mundo y lo representa, es un perceptor/representador de las cosas del mundo real y conceptual, para el caso clases de sustancias químicas y sus comportamientos, modelos, conceptos y teorías. Considera este autor que las personas representan internamente el mundo y la enseñanza trata de la interacción de las percepciones/representaciones de alumnos y profesor (previas y nuevos constructos) con respecto a los materiales educativos. En esta vía, Greca y Moreira (2002) presentan una propuesta representacional integradora

fundamentada en la teoría de campos conceptuales de G. Vergnaud (1990, 1994, 1996, 1997, y en Moreira, 2002) y los modelos mentales de Johnson Laird (1983) con el fin de permitir una mejor comprensión de varios de los procesos cognitivos implicados en el aprendizaje de conceptos científicos y de modelos físicos y matemáticos. Propuesta que puede considerarse como referente en el campo de la enseñanza y el aprendizaje de Química

Estos autores han derivado de sus investigaciones educativas en el campo de la Física y las Matemáticas y de otros estudios una formulación posible de ser extendida al ámbito del aprendizaje de modelos y conceptos en Química, en la cual podrían estar incluidos los elementos cognitivos planteados por Turro (1986), como aquellos vinculados a los modelos matemáticos y físicos necesarios para la solución de problemas en Química.

Greca y Moreira (2002), han afirmado que la comprensión de conceptos físicos y la generación de modelos mentales por los estudiantes para explicar y predecir situaciones físicas, son determinados por el conocimiento general de los alumnos y por conocimientos más fundamentales que actuarían como núcleos de los modelos mentales. Estos núcleos tienen la característica de ser entidades muy estables de la estructura cognitiva que determinarían el conjunto de situaciones a ser percibidas como similares y cuyo contenido estaría definido por elementos de modelos físicos y matemáticos. Articulan esquemas y modelos mentales como dos niveles de representación, actuantes de modo dialéctico en el proceso de comprensión. El primero, estable en la memoria de largo plazo y el segundo, dinámico y temporal, generado en la memoria de corto plazo como modelo de trabajo. El contenido de los esquemas, conceptos y teoremas-en-acción del sujeto, tienen un rol central en la construcción y rodada del modelo mental. Los conceptos-en-acción guían la construcción de modelos mentales en la medida que podrían mapear y determinarían los elementos relevantes de la situación objeto de representación, tendrían el papel de realizar una lectura significativa de la información relativa a la situación y su representación; los teoremas-en-acción determinarían las relaciones que sobre las representaciones deberían ser aplicadas en el proceso de búsqueda de soluciones y de elaboración de inferencias.

Los modelos mentales como modelos de trabajo en la memoria de corto plazo actuarían como intermediarios entre la situación y el conocimiento de la persona, resultan en el espacio en que los esquemas operatorios de los sujetos manipulan las representaciones de la realidad con el objetivo de actuar sobre ella (Ibid:15). En este espacio acontecen los procesos de comparación, similaridad, diferencia, coherencia, e incoherencia entre los datos y los resultados del modelo mental, lo cual puede provocar la modificación de éste y detectar nuevos invariantes operatorios que podrían originar la construcción de nuevos esquemas para la clase de situaciones dadas.

Como los modelos mentales son análogos estructurales de cosas del mundo y pueden ser analógicos o parcialmente analógicos y parcialmente proposicionales (Johnson Laird, 1983), las imágenes mentales son parte integral del modelo mental. Una imagen mental de una situación es como el cuadro de entrada de su representación por el sujeto, mapeada por los conceptos-en-acción a la luz de la información disponible, transformada a modelo de trabajo por los teoremas-en-acción, los cuales tienen la capacidad de generar inferencias (Greca, Moreira, 2002:16).

Integrada a las ideas anteriores, está la definición dada por Vergnaud (1997:6) al término concepto como una tripleta de los conjuntos: S: conjunto de situaciones que hacen el concepto útil y significativo; I: conjunto de invariantes operacionales usados por el individuo para tratar con las situaciones; R: conjunto de representaciones simbólicas, lingüísticas, gráficas o gestuales que pueden ser utilizadas para representar situaciones, invariantes y procedimientos, esto es $C = (S, I, R)$. Esta descripción aplicada a los conceptos de sustancia - modificación química y física, fórmula desarrollada y la respectiva conceptualización, en la mirada expuesta en este texto, invita a que profesores e investigadores en enseñanza y aprendizaje de la química se preocupen por seleccionar y clasificar clases de situaciones para las cuales son útiles grupos de fórmulas químicas y de invariantes operatorios como sustancia, elemento y mezcla. Esta perspectiva podría progresar en el tiempo, en la idea también planteada por Vergnaud (Ibid:26) para el aprendizaje de conceptos matemáticos y por Greca y Moreira (Ibid:14) para los conceptos físicos, de facilitar el cambio de estatus de los conceptos en el transcurso del desarrollo cognitivo: el concepto como instrumento y el concepto como objeto de pensamiento, el conocimiento como forma operatoria y el conocimiento explicitado en su forma predicativa, para lo cual juega un rol muy importante la clase de simbolismo utilizado en la conceptualización.

Acorde con las ideas anteriores, la enseñanza de la Química debería procurar el aprendizaje significativo por los alumnos de las fórmulas estructurales, grafos moleculares y geometrías definidas, como sustitutos racionales de las sustancias en contexto, esto es, como las representaciones internas de cada alumno que dada su naturaleza metafórica tienen la función de actuar como imagen para representar inicialmente la situación, definida por los conceptos-en-acción y ser transformada en modelo de trabajo al interactuar con sus teoremas-en-acción como se dijo anteriormente, conceptos y teoremas-en-acción construidos en la interacción en el aula con los materiales educativos, el profesor y demás alumnos y en otros ambientes fuera del aula.

Fórmulas químicas desarrolladas o estructuras químicas, o representaciones moleculares en su amplia diversidad funcional y de clases y subclases de familias químicas, dado su carácter analógico como representaciones de las sustancias en contexto, conceptos y teorías químicas, así como conocimiento geométrico y otros según clases de situaciones seleccionadas, podrían ser abordadas en la investigación en la mira de esta propuesta integrada con el propósito de indagar

en primer lugar, algunos invariantes operatorios antecedentes de los alumnos, y en una segunda parte los procesos de posible construcción de modelos mentales y nuevos esquemas vinculados a ciertas clases de situaciones químicas mediante una propuesta de intervención en el aula.

4. Reflexiones finales

En este texto se reflexiona la importancia del concepto estructura molecular, algunas ideas relacionadas con sus raíces epistemológicas e históricas y su pluralidad lingüística y funcional, así como la necesidad de intensificar su comprensión y la utilización de él en los procesos de investigación en enseñanza y aprendizaje de la química, en particular con aquellas propuestas dirigidas a estudiar los procesos de desarrollo cognitivo de los estudiantes.

Este compromiso, por grupos de investigadores y docentes, puede sin duda aportar a superar aspectos penosamente despreciados en la educación en Química, abrirse ésta a la pluralidad de significados y de representaciones inherentes a grupos de sustancias químicas conceptualizadas como objetos dinámicos en los procesos de separación, síntesis y otras modificaciones de ellas en contexto. La investigación en este campo podría contribuir a una enseñanza más comprensiva y conceptualmente más clara y diferenciada para facilitar contrarrestar en primer lugar, la idea según la cual la Química es hacer experimentos rutinarios, simplistas y llamativos a la percepción sensorial; en segundo lugar, a abandonar la idea de que su simbolismo es una cuestión mecánica, no objeto de enseñanza ni de aprendizaje; y en tercer lugar, a combatir el alto predominio de unos pocos conceptos únicos y simples y la alta operatividad arraigada en los cálculos estequiométricos.

La Investigación educativa en Química podría poner más atención a como los alumnos desarrollan sus procesos cognitivos para el aprendizaje de los modelos de la química; que representaciones internas construyen cuando tratan con familias de sustancias que se corresponden con una o varias funciones químicas, lo cual da lugar a subclases; a su vez familias y subclases son representadas con determinados grupos de fórmulas estructurales como grafos moleculares, los cuales tienen un papel plurifuncional en la selección según los datos rastreados con teorías químicas; grafos moleculares adoptan formas definidas en contextos específicos; formas definidas que a su vez son tratadas como organizaciones estructurales de interacciones entre núcleos y electrones tratadas con la química cuántica y otros modelos. Vinculado a cada serie de relaciones estructurales de cada grupo de estructuras químicas, el concepto de enlace químico adquiere diversos significados y diferentes funcionalidades en una variedad de teorías para la comprensión, la explicación y la inferencia.

Terminamos con una inquietud similar a la planteada por Bachelard (1976:170) la cual es además un reto: enseñar la racionalidad de lo múltiple más allá del racionalismo de la identidad, no es sin duda la enseñanza más simple de la

Química contemporánea. Racionalidad de la identidad, fórmulas de composiciones empíricas y moleculares, crean un amplio espectro de fórmulas desarrolladas que implican como anota este autor, misceláneas de símbolos y resonancias de teorías, esto es, el nómeno complejo y con muchas funciones. ¿Cuáles son las representaciones de los alumnos? ¿Cómo progresan?, es sin duda un problema no simple que requiere abandonar las dicotomías y la conceptualización cerrada, lineal y mecánica, y una profunda conciencia semántica para comunicar la conciencia de significados múltiples y movilizar el pensamiento.

5. Referencias

Alzate, M. V., Restrepo C., Moreno F., *Fórmulas Estructurales: Un Aprendizaje Significativo en Química*, 2001, Memorias XII Congreso Colombiano de Química.

Alzate, M. V., *Aprender Significativamente y Lenguaje Químico*, 2006, *Investigações em Ensino de Ciências*, UFRGS (en trámite).

Ausubel, D. P., *Adquisición y Retención del Conocimiento Una perspectiva cognitiva*, 2002, Paidós, Barcelona.

Bachelard, G., *La Filosofía del No*, 1993 (1940), Amorrortu editores, Tercera reimpresión, Buenos Aires (Traducción del francés Noemí Fiorito de Labruno).

Bachelard, G., *Epistemología*, 1973 (1971), Editorial Anagrama, Barcelona (Textos escogidos por Dominique Lecourt, traducción del francés Elena Rosa).

Bachelard, G., *Conocimiento común y Conocimiento Científico*, 1976, en *El Materialismo Racional*, Editorial Paidós, Buenos Aires.

Bhrushan, N., Rosenfeld S., *Metaphorical Models in Chemistry*, 1995, *Journal of Chemical Education*, 72, 7, 578 – 582.

Bhrushan, N., Rosenfeld S., *Of Minds and Molecules*, 2000, Oxford University, New York.

Brown, T. L., Lemay H. E., Bursten, B. E., *Química La Ciencia Central*, 1991, Prentice-Hall, Quinta edición, México (Traducción del inglés Ma. Del Consuelo Hidalgo y Mondragón).

Casabó i Gispert, J., *Estructura Atómica y Enlace Químico*, 1996, Editorial Reveté, S: A., 392 pag.

Cruz G., Chamizo, J., Garritz, A., *Estructura Atómica un Enfoque Químico*, 1991, Addison-Wesley Iberoamericana, 1^{ra} reimpresión, México, 820 pag.

Chang, R., *Química*, 2003, MacGraw-Hill, Séptima edición, México (Traducción del inglés Ma. Del Carmen Ramírez Medeles, Rosa Zugazagoitia Herranz).

Dennis, K. M., Chambrón J. C., *Chemical Topology*, 1995, *Journal of Chemical Education*, 72, 12, 1059 – 1063.

Eckroth, D., *The Correct von Baeyer Name for (Buckminster)fullerane*, 1993, *Journal of Chemical Education*, 70, 8, 609 – 611.

Greca, I., Moreira, M. A., *Além da Detecção de Modelos Mentais dos Estudantes Uma Proposta Representacional Integradora*, 2002, *Investigações em Ensino de Ciências*, 7, 1, Site: <http://www.if.ufrg.br/public/ensino/revista.htm>

Hoffmann, R., Lazlo, P., *Representation in Chemistry*, 1991, *Angewandte Chemie*, 30, 1, 1–16.

Jensen, W., Logic, History, and the Chemistry Textbook, I. Does Chemistry have a Logical Structure?, 1998a, *Journal of Chemical Education*, 75, 6, 679 – 685.

Jensen, W., Logic, History, and the Chemistry Textbook, II. Can We Unmuddle The Chemistry Textbook?, 1998b, *Journal of Chemical Education*, 75, 7, 817 – 828.

Jensen, W., Logic, History, and the Chemistry Textbook, III. One Chemical Revolution or Three? 1998c, *Journal of Chemical Education*, 75, 8, 961 – 969.

Johnson Laird, P., *Mental Models*, 1983, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts.

Klein, D. J., Aromaticity via Kekule Structures and Conjugated Circuits, 1992, *Journal of Chemical Education*, 69, 9, 691 – 700.

Kluge, F., Larder, D., A. M. Butlerov: On the Chemical Structure of Substances, 1971, *Journal of Chemical Education*, 48, 5, 289 – 291.

Manku, G. S., *Principios de Química Inorgánica*, 1990, MacGraw-Hill, Primera edición, México (Traducción Raymundo Cea Olivares).

Mihalić, Z., Trinajstić, N., A Graph-Theoretical Approach to Structure-Property Relationships, 1992, *Journal of Chemical Education*, 69, 9, 701 – 712.

Mó Yáñez, M., *Enlace Químico Y Estructura Molecular*, 2000, J. M. Bosch Editor, Barcelona.

Moreira, M. A., *Aprendizaje Significativo: Teoría y Práctica*, 2000a, Aprendizaje Visor, Madrid.

Moreira, M. A., Aprendizaje Significativo Subversivo, Actas III Encuentro Internacional sobre Aprendizaje Significativo, 2000b, pp 33-45 (Traducción del portugués Ileana Greca).

Moreira, M. A., A Teoría dos Campos Conceituais de Vergnaud, 2002, *Investigações em Ensino de Ciências*, 7, 1, <http://www.if.ufrg.br/public/ensino/revista.htm>

Novak, J. D. y Gowin, D. B., *Aprendiendo a Aprender*, 1988, Ediciones Martínez Roca, S. A., Barcelona.

Platt, J., R., 1964, *Science*, 146, 347-351.

Prélat, C., *Epistemología de la Química*, 1960, Espasa-Calpe Argentina S. A.

Randić, M., Chemical Structure- What Is “She”?, 1992, *Journal of Chemical Education*, 69, 9, 713 – 718.

Scerri, R. E., Philosophy of Chemistry – A New Interdisciplinary Field, 2000, *Journal of Chemical Education*, 77, 4, 522 – 525.

Schummer, J., The Chemical Core of Chemistry I: A Conceptual Approach, 1998, *Hyle-An International for the Philosophy of Chemistry*, 4, 2, 129-162.

Turro, N. J., Geometric and topological Thinking in Organic Chemistry, 1986, *Angewandte Chemie*, 25, 882-901.

Vergnaud, G., La Théorie des Champs Conceptuels, 1990, *Recherches en Didactique des Mathématiques*, 10, 23, 133-170.

Vergnaud, G., Multiplicative Conceptual Field: What and Why?, 1994, In Guershon, H., and Confrey, J., 1994 (Eds), *The Development of Multiplicative Reasoning in the Learning of Mathematics*, Albany, N.Y., State University of New York Press, pp 41-59.

Vergnaud, G., Education the Best Portion of Piagte's Heritage, 1996, *Swiss Journal of Phychology*, 55(2/3), 112-118.

Vergnaud, G., The Nature of Mathematical Concepts. In, Nunes, T.& Bryant, P. (Eds), *Learning and Teaching Mathematics, an International Perspective Psychology*, 1997, Hove East (Sussex) Press Ltd.

Villaveces, J. L., La Enseñanza de la estructura de los Átomos y las Moléculas, 2001, *TEA, tecne, epistemic y didaxis*, Universidad pedagógica Nacional, Bogotá, N° 9, 108-119.

Weininger S. J., The Molecular Structure Conundrum: Can Classical Chemistry be Reduced to Quantum Chemistry?, 1984, *Journal of Chemical Education*, 61, 11, 939 – 943.

Wolley, R. G., Must a Molecule Have a Shape?, 1978, *Journal of American Chemical Society*, 100, 4, 1073-078.