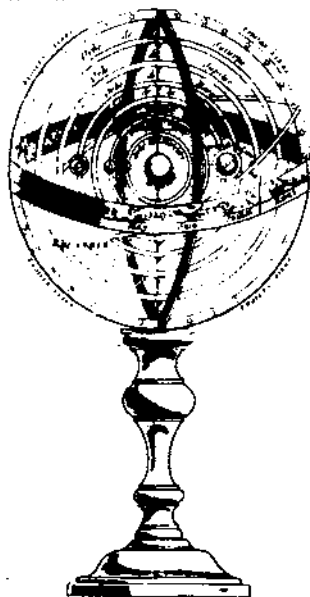


OTROS TRABAJOS



EL EMPLEO DE MODELOS EN LA ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

CASTRO, E.A.

INIFTA, División Química Teórica. Sucursal 4. Casilla de Correo 16. La Plata 1900, Argentina.

SUMMARY

The importance of using models in the teaching of chemistry is pointed out. The precise place and the significant meaning of models in the integral understanding of the chemical phenomena are analysed. Some classification schemes are given together with illustrative examples of each category.

I. INTRODUCCIÓN

El desarrollo de conceptos y modelos útiles representa una actividad central en la enseñanza de la Química. La utilidad de un concepto o modelo se encuentra en relación directa con su capacidad predictiva de explicación de los fenómenos químicos. Los modelos que son de amplia aplicabilidad, o sea aquéllos que permiten expli-

car una gran cantidad de fenómenos o sistemas se consideran usualmente más útiles que otros de validez restringida.

El empleo explícito de modelos se halla ampliamente presente en nuestra vida cotidiana: el análisis de la

situación sociopolítica de un país, las perspectivas futuras, la descripción del desenvolvimiento de las variables económicas, los aspectos psicológicos personales y grupales, el comportamiento de la sociedad ante determinadas situaciones, etc. se basan en esta aproximación.

El uso extendido de este concepto ha dado lugar a un desplazamiento progresivo del verdadero significado de la palabra, alejándose en gran medida de la acepción original vinculada a la definición de paradigmas que se asumen como referencia y a objetos que se imitan.

El nuevo significado dinámico del concepto «modelo» es actualmente de relevante importancia en la ciencia. La investigación científica usa modelos de manera muy intensa y amplia, basados en teorías apropiadas. A menudo la mera elaboración de un modelo es el núcleo central de la investigación y no los fenómenos en sí mismos.

Aunque la Química se encuentra profundamente involucrada en el uso de modelos, no siempre ello es considerado y reconocido explícitamente por los mismos químicos. Esta actitud algo conservadora se debe al hecho de que comúnmente se define a esta ciencia como esencialmente experimental, cosa bastante errónea. En efecto, si bien el «químico experimentalista» deja sus aparatos y materiales para elaborar los datos recogidos, él entra de lleno en el mundo de los modelos, las teorías y los presupuestos subyacentes a ellos. Y más aún, habitualmente la misma actividad experimental está basada en modelos (modelos materiales analógicos, según veremos más adelante).

Estas consideraciones generales son de relevancia en relación al proceso de enseñanza-aprendizaje-conocimiento de la Química, razón por la cual merece la pena plantear el papel que desempeña el concepto y uso de modelos en este particular contexto. Si bien este planteamiento reconoce antecedentes válidos (Andrade y Crivelli 1988), la propuesta y desarrollo que aquí se exponen son originales en el ámbito de la enseñanza de la Química.

El propósito de este trabajo es el de ofrecer definiciones precisas del término modelo y conceptos asociados, así como presentar una taxonomía, que si bien es arbitraria como toda clasificación, sirve de guía válida para encuadrar mejor el empleo de modelos en el proceso de la enseñanza-aprendizaje de la Química.

Esta exposición se hace a fin de marcar apropiadamente las diferencias que existen entre los conceptos «modelo», «teoría», «realidad física», «interpretaciones», etc. que si bien guardan una estrecha vinculación entre sí, usualmente son confundidos aún por los mismos docentes con las comprensibles consecuencias perniciosas para los educandos.

Este trabajo está organizado del siguiente modo: En la sección II se brinda la definición de modelo y referente junto con algunas características mínimas exigibles a un modelo adecuado. La siguiente sección trata del establecimiento de los modelos y una posible clasificación de los mismos, y en la cuarta sección los componentes de un modelo, con una especial mención al papel que

desempeñan las Matemáticas así como las unidades básicas materiales de los modelos. Finalmente, la última sección está dedicada a la discusión de todo lo anteriormente expuesto en relación al proceso de enseñanza-aprendizaje-conocimiento de la Química. En la medida de lo posible, cada sección ilustra los conceptos generales para hacer inteligible en forma directa el contenido de aquéllos y al mismo tiempo ir mostrando posibles aplicaciones pedagógicas.

II. CARACTERÍSTICAS GENERALES DE LOS MODELOS

En primer término debemos definir qué se entiende por el vocablo «modelo» en el ámbito de la ciencia. Como toda definición, ésta es arbitraria pero al mismo tiempo expresa lo que comúnmente se acepta y emplea en este terreno, y además resulta suficiente para nuestros actuales propósitos.

Definición (Pilar 1968): Un modelo es una construcción imaginaria (y por ende arbitraria) de un objeto (o conjunto de objetos) o proceso (o procesos) que reemplaza a un aspecto de la realidad a fin de poder efectuar un estudio teórico por medio de las teorías y leyes usuales.

Como los sistemas reales de interés son de por sí usualmente muy complejos para estudiarlos directamente, se los reemplaza por un modelo que es más sencillo de manejar y cuyo comportamiento se aproxima al del referente bajo un conjunto de condiciones límites bien definidas.

El modelo debe ser fácilmente visualizable y/o comprensible conceptualmente y además permitir un tratamiento cuantitativo riguroso, el cual conlleve una adecuada interpretación y, en el peor de los casos, constituya una primera aproximación al comportamiento del sistema objeto que el modelo representa. Asimismo, un modelo apropiado debe poder ser refinado conduciendo así a un entendimiento, visualización y/o caracterización más ajustado y profundo del sistema real.

Como imagen particularizada de un aspecto de la realidad, un modelo es por definición incompleto respecto del referente, el cual usualmente es un sistema complejo. Sólo algunas características del referente o sistema objeto se encuentran presentes en el modelo. Es muy común que existan diferentes modelos referidos al mismo sistema objeto. Estos modelos pueden seleccionar diferentes propiedades del referente debido a que hay distintas concepciones respecto de la que esencialmente caracteriza al mismo o porque hay distintos aspectos del objeto que se desean modelar. Así, la luz se puede modelar como partículas (fotones), ondas (ondas electromagnéticas) o partículas-ondas (naturaleza dual de la luz).

La coexistencia de distintos modelos que se utilizan en la selección de las propiedades características y en la finalidad del modelo es posible ya que hay diferentes niveles en la jerarquía o clasificación de aquéllos.

La coexistencia de modelos alternativos y/o competitivos nos conduce naturalmente a la necesidad de establecer algunos criterios necesarios de juicio para poder contar al menos con ciertos elementos mínimos de evaluación.

Algunos de estos sencillos criterios son:

Autoconsistencia: Un modelo no debe ser contradictorio. En el terreno científico, los modelos no pueden contradecir aquéllos principios básicos universalmente aceptados y las leyes particulares de cada ciencia. Todos aquéllos modelos que vinculan ciertas características del sistema objeto o del modelo mismo en oposición a determinados criterios básicos (por ejemplo, dimensionalidad) deberían ser considerados con reservas, ya que su capacidad predictiva puede ser debida a la casualidad o algunas cancelaciones mutuas de errores. Estos modelos pueden ser de aplicación muy limitada o pueden constituir una traba para llegar a explicaciones más satisfactorias de tales características.

Simplicidad: Aquéllos aspectos no esenciales del sistema objeto que son considerados por el modelo, usualmente entorpecen el empleo de éste y reducen su significación. Las suposiciones ad-hoc deben ser evitadas. La aplicación de este criterio no siempre es fácil: los modelos extremadamente sencillos pueden no llegar a tener en cuenta características importantes y no siempre fácilmente visualizables del referente; en consecuencia, son de poca utilidad en ciencia. El necesario balance entre simplicidad y completitud es harto delicado y es precisamente en este equilibrio en donde reside finalmente una medida significativa de los méritos del modelo. Estrechamente asociado a la simplicidad se encuentra la transparencia de un modelo: un buen modelo posee la propiedad de ser fácil de describir, comprender y aplicar.

Estabilidad: Debería ser posible introducir modificaciones, complementos y/o generalizaciones en el modelo sin que esto conlleve la destrucción de su estructura interna. En particular, debería ser posible apelar a un buen modelo sencillo como punto de partida o referencia para posteriores modelos de complejidad creciente con el fin de llegar a descripciones de mayor precisión de las propiedades del sistema objeto.

Utilidad: El modelo debería brindar informaciones, predicciones y/o correlaciones acerca de algunas propiedades del mismo que no se han introducido explícitamente en el proceso de elaboración, y estos datos deberían ser congruentes con las correspondientes características del referente. En otros términos, un modelo debe ser capaz de proporcionar algunas «sorpresas». En verdad, muchos modelos son de carácter tautológico, pero un modelo útil y eficiente ayuda a descubrir aspectos que sin su empleo llegarían a perderse y hace comprensible ciertos aspectos y propiedades del sistema objeto que sin la ayuda eficaz del mismo serían confusos o de discutible interpretación.

Generalidad: Un buen modelo debería permitir la identificación de conexiones y vínculos no evidentes en el proceso de su elaboración entre distintos referentes.

Existen amplias variedades de sistemas objeto que difieren mucho en su naturaleza pero que al mismo tiempo comparten algunos atributos y propiedades. Uno de los fines básicos de la indagación científica es hacer claras estas vinculaciones.

Matematicidad: Todo modelo debe ser matematizable, en el sentido de poder cuantificar sus predicciones, interpretaciones y correlaciones. Si bien no siempre se puede cuantificar un resultado posible de una manera biunívoca, o sea brindar un número o respuesta definitiva, y en ocasiones tal cuantificación se alcanza en términos menos precisos pero matemáticos al fin (por ejemplo, a través de probabilidades), es necesario requerir a un modelo respuestas precisas cuando se plantean adecuadamente cuestiones pertinentes y posibles de ser respondidas en forma cuantitativa.

En el campo específico de la Química, el objeto de un modelo es el de ayudar a interpretar los fenómenos químicos, permitir la predicción del comportamiento de sistemas químicos bajo condiciones específicas impuestas por el entorno circundante y establecer las adecuadas correlaciones entre conjuntos bien definidos de datos experimentales y cálculos teóricos. Obviamente, estas tres características se encuentran vinculadas y todas ellas son requeribles a un buen modelo ya que, por ejemplo, un modelo con buenas propiedades predictivas pero carente de interpretación es incompleto.

Los sistemas objeto en la Química son muy complejos. En efecto, aun en el caso del simple átomo de He no es posible conocer a partir de primeros principios su estructura electrónica, ya que es un sistema de tres cuerpos, problema todavía no resuelto exactamente en la Física. Cuando pasamos al estudio de moléculas y sistemas condensados, resulta harto clara la aseveración precedente respecto de la remarcable complejidad de los sistemas químicos.

Además, toda vez que se estudia un fenómeno químico, sea en forma primordialmente teórica o experimental (ya que no es posible establecer una partición disjunta entre estos dos modos de análisis), inevitablemente se debe recurrir a alguna aproximación, modelística por cuanto la limitación de nuestros sentidos no nos permite visualizar directamente los fenómenos y resultados emergentes de los experimentos. Y así, uno imagina de algún modo cómo suceden las cosas y esto es equivalente a decir que se establece un modelo.

Sin embargo cabe la siguiente cuestión: al determinar datos experimentales u obtener valores numéricos provenientes de un cálculo teórico, ellos mismos están brindando una información acerca del referente químico y en tal sentido parecería innecesario apelar al uso de modelos. Esto es cierto en cuanto consideramos a aquéllos en forma aislada, pero la mera determinación de datos experimentales y/o la obtención de valores numéricos que surgen de un cierto cálculo molecular no constituyen ellos mismos y solos un aporte científico válido. Sólo cuando se racionalizan y se inscriben en el marco más general de una teoría y al mismo tiempo se asocian a otros resultados que permiten comprender mejor una cierta clase de fenómenos, se puede hablar con propie-

dad de ciencia, y es precisamente en estos últimos aspectos donde el concepto de modelo juega un papel central.

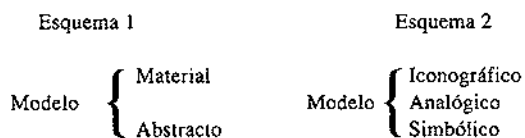
Pero entonces, cuando el docente supone que está enseñando Química, una ciencia «eminentemente experimental», en realidad, ¿qué está haciendo? Si en realidad enseña la Ciencia Química, trata de los aspectos experimentales y/o numéricos (información de carácter primario) junto con un cuerpo de leyes, hipótesis y principios estrechamente vinculados al empleo de modelos (herramientas complementarias sujetas a posibles modificaciones).

III. ESTABLECIMIENTO Y CLASIFICACIÓN DE LOS MODELOS

Un modelo que es ajustado respecto de algunos aspectos del sistema objeto surge de un proceso de reducción de la información asequible acerca del referente, y tal proceso asume características específicas en la Química. El proceso de reducción de la información tiene que ver no sólo con el paso de objeto a modelo sino también con la utilización de este último. Éste es un aspecto significativo en el diseño y empleo del modelo.

Debido a lo complicado de los sistemas químicos, el proceso de construcción de modelos es complejo y cíclico. El modelado comienza a partir de una interpretación preliminar de las características del sistema objeto y uno de los posibles usos del modelo es justamente obtener una mejor definición del objeto mismo. Se llega a establecer así un ciclo interactivo, donde un modelo preliminar se emplea para llegar a una apropiada definición del objeto, y que posteriormente permitiría obtener un modelo satisfactorio por medio de aproximaciones sucesivas, en tanto no aparezcan colapsos o fallos definitivos. A modo de ejemplo, podemos citar el caso de una reacción bioquímica que ocurre «in vivo» y que puede servir para distintos sistemas objeto, desde el cuerpo vivo completo hasta una célula, hasta la subestructura celular, hasta una cantidad limitada de moléculas o átomos. En efecto, estas definiciones intermedias de sistemas materiales (cuerpo, célula, subestructura, etc.) son también modelos de una clase particular.

En relación a la clasificación de los modelos, recurrimos a los siguientes esquemas alternativos y complementarios al mismo tiempo



Un modelo iconográfico se basa en su similitud en forma con el objeto. Ejemplos característicos en la ciencia molecular los proporcionan el modelo de llave-cerradura de la Enzimología (abstracto) y los modelos moleculares de esferitas y barras rígidas (material).

Un modelo analógico mantiene algunos aspectos de forma del objeto pero da énfasis a las propiedades funcionales o de comportamiento del objeto. Así, el modelo molecular de masas y resortes constituye un modelo material analógico en el estudio de las vibraciones moleculares, y un sistema químico compuesto por un sustrato y un polímero sintético apropiado conforma también un modelo material abstracto para estudiar algunos aspectos en Enzimología.

Un modelo simbólico no considera la analogía de forma con el objeto y sólo se basa en la analogía funcional con ésta. Éste es el campo específico de los modelos matemáticos (desde la Mecánica Cuántica a la Termodinámica), aunque la importancia de otra clase de modelos (no matemáticos) no debe dejarse de lado como componentes de esta categoría. Un ejemplo muy apropiado de modelo simbólico abstracto de naturaleza no matemática lo constituye la Tabla Periódica de los Elementos Químicos. Los modelos simbólicos también pueden ser de composición material. Por ejemplo, los modelos simbólicos para estudiar las vibraciones moleculares están conformados a la vez con un conjunto de ecuaciones diferenciales (abstracto) y otro conjunto de osciladores eléctricos acoplados (material).

Esta aproximación esquemática para la taxonomía de modelos es arbitraria y por ende se encuentra sujeta a críticas. La selección de los términos puede variar respecto de la terminología usada corrientemente en la modelística, pero en todo caso es similar a la empleada por Bunge (1985), y la misma fue hecha con el propósito de otorgar énfasis a los aspectos estructurales de este tema, dejando de lado consideraciones que pueden llegar a ser de importancia significativa en la clasificación de los modelos.

Un aspecto adicional vinculado al uso de modelos merece destacarse aquí. Nuestra comprensión del mundo de los sistemas objeto deriva de indagaciones realizadas sobre modelos y durante este proceso la situación de un modelo puede variar. Un caso singular en la Química lo constituye la molécula. En efecto, hacia mediados del último siglo, la molécula era un modelo simbólico abstracto (no matemático). Luego pasó al rango de modelo analógico y eventualmente saltó del mundo de los modelos al universo de los sistemas objeto materiales. En consecuencia, las estructuras de esferitas y barras rígidas ya no pueden ser consideradas como un modelo de un modelo, sino como modelizaciones iconográficas de sistemas materiales.

Lo mismo ocurre con la descripción de Schrödinger de los sistemas materiales: este modelo simbólico abstracto (matemático) ha alcanzado recientemente un nivel de modelo analógico y así es frecuentemente traducido con la ayuda de gráficos computarizados en modelos iconográficos.

Es importante recalcar el papel central que juegan los modelos en la descripción de los fenómenos químicos: a menudo los sistemas materiales en estudio son modelos materiales analógicos y la interpretación de los resultados experimentales y/o el análisis de los datos numéricos se basan en el empleo de modelos abstractos soportados por modelos analógicos iconográficos.

IV. COMPONENTES DE LOS MODELOS QUÍMICOS

Debido a ciertas particularidades que presenta el estudio de la Química es conveniente introducir una distinción entre los componentes de los modelos. Esta partición toma en consideración los aspectos analógicos que los modelos corrientes poseen y que pueden ser aplicados a la casi totalidad de los modelos empleados en la Química (Tomasi 1988).

– *Modelo material*: La parte material del modelo es la porción de materia descrita por el modelo. La misma puede corresponder a la parte efectiva de materia en la cual el fenómeno se observa o puede estar constituida por una reducción o simplificación apropiada de ella.

– *Modelo físico*: Los aspectos físicos del modelo consideran de un modo explícito o implícito las interacciones físicas del objeto. En algunos casos es conveniente introducir una distinción entre aquellas interacciones que involucran sólo elementos del sistema material e interacciones del sistema con el medio externo.

– *Modelo matemático*: Las características matemáticas del modelo son los métodos y aproximaciones usadas para describir cuantitativamente las interacciones físicas en el modelo material.

La consideración de estas componentes de los modelos químicos es de utilidad para juzgar a los mismos. A modo de ejemplo pasemos a analizar brevemente los modelos empleados en el estudio de las reacciones químicas. El modelo material se puede reducir a dos moléculas interactuantes y con ello basarse en la suposición de que un choque bimolecular es suficiente para describir la reacción, si aún se puede recurrir a modelos materiales más simples (tal como un par de moléculas de menor tamaño o modelos algo más complicados consistentes en un conjunto de osciladores acoplados) suponiendo que el remanente molecular se puede omitir en el modelo. Pero también lo opuesto puede suceder y así la composición material aumentarse por inclusión de un tercer cuerpo, las paredes del reactor, una cantidad variable de solvente, etc.

El modelo físico se puede reducir a las fuerzas electrostáticas en el formulismo cuántico actuante en los sistemas bimoleculares, o reducirse a algunos componentes del mismo, o extenderse en la consideración de fuerzas no-electrostáticas, o incluir la interacción con un baño térmico, etc.

El modelo matemático determina el nivel de los cálculos mecano-cuánticos (Hartree-Fock, post-Hartree-Fock, etc.), el conjunto de funciones base, las aproximaciones (si las hay) en la evaluación de los elementos de matriz, etc. La elección entre las formulaciones dependientes o independientes del tiempo influye tanto a los aspectos físicos como matemáticos del modelo.

Un examen sistemático y crítico de estos aspectos junto con los criterios expuestos anteriormente constituyen un paso esencial en el juicio de un modelo. Por ejemplo, para una composición material y física dada la mejora de los aspectos matemáticos (cálculo de mayor complejidad y precisión) podría llegar a optimizar la utilidad del modelo pero muy probablemente a expensas de que decrezca su grado original de transferencia y simplicidad.

Aquí merece destacarse el hecho de que el propósito primario de los modelos es obtener una interpretación de las interacciones físicas en el fenómeno químico y éste conlleva a considerar las unidades materiales básicas a los fines de concretar esta información. En las ciencias moleculares, dicha unidad básica es la molécula, aunque con el paso del tiempo los químicos han buscado trascender este nivel de discriminación. Las unidades básicas del nivel submolecular (átomos en moléculas, grupos funcionales, orbitales moleculares canónicos, orbitales localizados, híbridos atómicos, etc.) no se encuentran fundamentadas y apoyadas por la evidencia de que nace de los sistemas objeto tal como lo son las moléculas y corresponden a un mayor nivel de abstracción en el modelado de los fenómenos químicos. Este aspecto merece particular atención al examinar los modelos químicos.

Finalmente es de significación considerar el papel que desempeñan las Matemáticas en el establecimiento de los modelos. Existe una opinión generalizada consistente en asignar a esta ciencia un lugar secundario de mero sostén en el establecimiento de un lenguaje puramente servil. Y así, si las Matemáticas proveen, por ejemplo, los medios adecuados para resolver ecuaciones, en contraposición nada aportan acerca de conocimiento de la naturaleza de las leyes del Universo.

Sin embargo, diversas aportaciones de relevancia en la Física de este siglo han mostrado que varios descubrimientos, matemáticos han hecho mucho más que sugerir ideas útiles a los experimentalistas. En efecto, tales especulaciones netamente matemáticas han dado nacimiento a objetos enteramente nuevos en la Física (Boutot 1989). A posteriori, la experiencia ha confirmado que tales conceptos abstractos están muy conectados con la realidad profunda de la materia y el movimiento.

Esto ha llevado a plantear la relación de las Matemáticas con la realidad y a preguntarse si lejos de ser simplemente el lenguaje de las ciencias de la naturaleza, las Matemáticas no serán ellas mismas la naturaleza (Boutot 1989).

V. LOS MODELOS EN EL PROCESO DE ENSEÑANZA / APRENDIZAJE / CONOCIMIENTO DE LA QUÍMICA

La palabra «modelo» es el término más comúnmente usado en la literatura científica contemporánea. Es posible que haya una fuerte influencia de la moda en este remarcable empleo de la palabra «modelo». Después de todo, también los científicos son influenciados por las escalas de valores, actitudes y conceptos implícitamente establecidos, y consolidados tanto por la comunidad civil como la científica.

Si bien la Química, como todas las ciencias de la naturaleza, abarca tanto los aspectos teóricos como experimentales, hasta hace poco tiempo se ha considerado como primordialmente experimental y por ello se ha desarrollado a lo largo de líneas empíricas de modelado. Así, junto con el progreso experimental, aquellos modelos elaborados para sistemas relativamente sencillos y de aplicabilidad restringida fueron sucesivamente revisados, supervisados y extendidos para una amplia gama de sistemas y fenómenos. Cuanto más generales y sofisticados son los modelos, a menudo, aunque no necesariamente, poseen una estructura más compleja. La práctica bastante usual de extender un modelo mediante la incorporación de términos adicionales inevitablemente conduce a una complejidad creciente (Kvarheim 1989).

Los conceptos presentados en secciones previas acerca de los modelos no son totalmente rigurosos y sistemáticos. Tal como fuera puntualizado, tales conceptos y clasificaciones se han escogido por ser los más aptos para nuestros fines así como por razones de uso extendido en la Química.

Los lectores interesados en ahondar en el tema de referencia deben dirigir su atención a una nueva rama específica de las disciplinas científicas denominada Modelística. Esta especialidad estudia, analiza y formaliza rigurosamente los procesos que originan la formación de los modelos en Ciencia.

¿Qué papel juegan los modelos en el proceso de enseñanza-aprendizaje-conocimiento de la Química?

Es de esperar que el lector haya encontrado ya algunas respuestas en las secciones anteriores. A modo de síntesis y necesario complemento a lo ya puntualizado, pasemos a ofrecer algunas respuestas posibles.

– En primer término se debe tener bien clara la diferencia existente entre experiencias y cálculo por un lado, e interpretación y análisis por el otro. Es en esta segunda categoría donde aparece el uso de modelos. Aunque considerados como datos primarios, las experiencias y cálculos no son en términos absolutos «fuente primaria de información», pues se encuentran condicionados por diversas condiciones de contorno. Pero respecto de la fenomenología química y teniendo en cuenta las restricciones mencionadas, sí son la fuente original de información y «son lo que son». En cambio, la interpretación, análisis y correlación de resultados entran en la esfera de lo relativo y dependen fuertemente de diversos «a priori»: las hipótesis fundamentales, el modelo escogido, el marco aproximativo de referencia, etc.

– Los dos diferentes niveles de existencia mencionados en el punto previo en modo alguno implican mayor importancia de uno respecto del otro; ambos poseen igual relevancia.

– Enseñar un determinado tema en Química implica necesariamente establecer con toda nitidez cuál o cuáles son los datos primarios (el experimento en sí), cuáles las leyes sobre las que se basará la interpretación, análisis y eventual correlación o comparación, y cuál es el modelo (construcción imaginaria) que nos permita «ver» el fenómeno. Entre los problemas que se encuentran en la enseñanza de la Química, uno muy común es confundir estos tres aspectos, y así se llegan a considerar como datos primarios ciertas construcciones inherentes a un determinado modelo y/o teoría. Ejemplo característico de esta situación lo constituye el concepto de Orbital Molecular, que es una construcción emergente de una teoría (la teoría de Orbitales Moleculares) que es aproximada y que en consecuencia no puede proporcionar en modo alguno datos primarios. La manera en que se presenta este concepto y el empleo que se hace en la discusión de estructuras, estabildades y reactividad química da la impresión de que se trata de un dato primario, cosa que obviamente no es (Scerri 1989, Ogilvie 1990, Pilar 1978, Wittel y McGlynn 1977).

– La enseñanza integral de la Química implica ofrecer las opciones necesarias para que el educando gane capacitación tanto en el terreno experimental y computacional como el de la teoría y la interpretación.

En particular y en relación al tema central de este trabajo debe saber qué clase de modelo está usando y cómo manejarlo, teniendo claro cuáles son las limitaciones del mismo y cuáles sus posibles extensiones y generalizaciones.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANDRADE, C. y CRIVELLI, I., 1988. Consideraciones acerca del concepto de modelo como medio de comprensión del mundo que nos rodea y como formador de seres sociales, *Revista Chilena de Educación Química*, 13 (1), pp. 28-30.
- BOUTOT, A., 1989. Le pouvoir créateur des mathématiques, *La Recherche*, 215, pp. 1340-1348.
- BUNGE, M., 1985. *La investigación científica*. (Ariel: Barcelona).
- KVARHEIM, O.M., 1989. Model building in chemistry, *Analytica Chimica Acta*, 223, pp. 53-73.
- OGILVIE, J.F., 1990. The nature of the chemical bond-1990. There are no such things as orbitals, *Journal of Chemical Education*, 67, pp. 280-289.
- PILAR, F.L., 1968. *Introductory Quantum Chemistry*. (Wiley: New York).
- PILAR, F.L., 1978. As is always above 3d! or How to tell the orbitals from wave functions, *Journal of Chemical Education*, 55, pp. 2-6.
- SCERRI, E.R., 1989. Transition metal configurations and limitations of the orbital approximation, *Journal of Chemical Education*, 66, pp. 481-483.
- TOMASI, J., 1988. Models and modeling in theoretical Chemistry, *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)*, 179, pp. 273-292.
- WITTEL, K. y Mc. GLYNN, S.R., 1977. *Chemical Reviews*, 77, pp. 745-771.